

Título de la Tesis: “Propiedades adsorptivas de hidrocarburos cíclicos C₅H₅ sobre Pt(111) estudio teórico sobre orbitales moleculares”

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Brizuela, Graciela Petra

Directores: Dr. Norberto Castellani

Resumen

En esta tesis se han estudiado teóricamente los procesos de adsorción y reacción de especies cíclicas C₅ sobre Pt (111). Para la realización del trabajo se utilizó un método semiempírico de orbitales moleculares. En particular se optimizó la geometría de adsorción de las especies *c*-C₅H₁₀, *c*-C₅H₈ y *c*-C₅H₅. Se calcularon además las frecuencias de vibración adsorbato-metal, C-H y C-C y las densidades de estados electrónicos en cada caso. Los resultados obtenidos permiten explicar modelos previamente propuestos, apoyados en datos experimentales. Los mecanismos de deshidrogenación de ciclos C₅ y la coadsorción con Bi también son analizados.