

**Título de la Tesis: "Catalizadores bimetálicos modelo. Estudios teóricos sobre la adsorción de monóxido de carbono en Pd/W .1991"**

**Doctorado en Química**

**Autor: Ferullo, Ricardo Mario**

**Director: Dr. Norberto Castellani**

### **Resumen**

En esta tesis se ha estudiado teóricamente la influencia electrónica que un sustrato de tungsteno ejerce sobre una monocapa de paladio en lo que atañe a su capacidad para la quimisorción de monóxido de carbono, utilizando para ello un método semiempírico de orbitales moleculares. En particular el sistema CO/Pd/W(110) ha sido examinado en relación con los casos de CO/Pd(100) y CO/W(110). Nuestros resultados apoyan la evidencia experimental existente sobre la inhibición en la quimisorción de CO en los sistemas Pd/W. Este comportamiento se explica en términos de la estructura electrónica de la molécula de CO y se correlaciona con un corrimiento de la banda de valencia del Pd hacia mayores energías de enlace.