

ESTUDIO COMPUTACIONAL COMPARATIVO DE LA ADSORCIÓN DE ÁCIDO FÓRMICO Y ETANOL SOBRE CAO(001)

A COMPARATIVE COMPUTATIONAL STUDY OF THE ADSORPTION OF FORMIC ACID AND ETHANOL ON CAO(001)

**Valeria Orazi^{a,b}, Pablo Bechthold^{a,b}, Jorge M. Marchetti^c, Estela González^{a,b}, Paula
Jasen^{a,b} y Alfredo Juan^{a,b}**

^aIFISUR (UNS-CONICET), Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina, ifisur@uns.edu.ar,
<https://www.ifisur.conicet.gov.ar>

^bDepto. de Física, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, (8000) Bahía Blanca, Argentina,
dpfísica@uns.edu.ar, <http://www.fisica.uns.edu.ar>

^cFaculty of Science and Technology, Norwegian University of Life Sciences, Drøbakveien 31, 1432 Ås,
Norway, post-realttek@nmbu.no, <https://www.nmbu.no/en/faculty/realttek>

Palabras clave: Superficie de Óxido de Calcio (001), Ácido Fórmico, Etanol, DFT.

Resumen. En este trabajo se comparan los resultados de los procesos de adsorción de las moléculas de etanol y de ácido fórmico sobre la superficie de Óxido de Calcio (001). Ambos estudios se realizan mediante simulación computacional, utilizando el paquete de simulación Vienna ab Initio (VASP) el cual está basado en la teoría funcional de la densidad (DFT), se han agregado además correcciones de Van der Waals en ambos sistemas. Nuestros cálculos para el etanol revelan que el proceso de adsorción ocurre con energías cercanas a los -1,14 eV en el sitio más favorable. Mientras que la energía de adsorción para la configuración final más estables de la molécula de ácido fórmico sobre la superficie alcanza los -2,38 eV, prácticamente el doble. La adsorción de las moléculas con la superficie, en ambos casos, se desarrolla a través de la interacción del hidrógeno molecular con un oxígeno de la superficie, y de los oxígenos de las moléculas con los átomos de Ca de la superficie.

Keywords: Calcium Oxide Surface (001), Formic acid, Ethanol, DFT.

Abstract. In this work, the results of the adsorption processes of ethanol and formic acid molecules on the surface of Calcium Oxide (001) are compared. Both studies are carried out through computational simulation, using the Vienna ab Initio simulation package (VASP) which is based on the density functional theory (DFT), Van der Waals corrections have also been added in both systems. Our calculations for ethanol reveal that the process occurs with an adsorption energy of -1.14 eV at the most favourable site. While the adsorption energy for the most stable final configuration of the formic acid molecule on the surface reaches -2.38 eV. The adsorption of the molecule with the surface, in both cases, takes place through the interaction of molecular hydrogen with an oxygen on the surface, and of the oxygens of the molecules with the Ca atoms on the surface.