



**XXIV Congreso Argentino de Catálisis**

**San Luis, Argentina**

**29 al 31 de octubre de 2025**

## **Conferencia**

### **De los Espectros al Mecanismo: Decodificando la Catálisis sobre Óxidos mediante IR y DFT**

**Adrián Lionel Bonivardi**

*INTEC, CONICET-UNL*

Para diseñar racionalmente catalizadores basados en óxidos con un desempeño optimizado, es fundamental conocer profundamente los mecanismos de reacción. Este conocimiento puede lograrse eficazmente integrando la espectroscopia infrarroja (IR) in situ y operando con cálculos de la teoría del funcional de la densidad (DFT), un enfoque que decodifica el comportamiento catalítico a partir de las huellas espectroscópicas.

Aplicada a procesos industrialmente relevantes, esta metodología combinada IR+DFT ha permitido descubrir detalles mecánicos críticos: (i) especies formiato identificadas como intermediarios clave en la síntesis de metanol a partir de la hidrogenación de  $\text{CO}_2$  en catalizadores de Pd-Ga y en la reacción de desplazamiento del gas de agua en materiales basados en ceria; (ii) el dopado de ceria con Ga ha demostrado que promueve la formación de hidruros, mejorando la actividad para la hidrogenación selectiva de acetileno; (iii) las distintas configuraciones de etoxi y sus transformaciones sobre las caras de nanocubos y nanooctaedros de  $\text{CeO}_2$  han mostrado que influyen de manera crítica en la selectividad durante el reformado de etanol con vapor, con tendencias similares observadas para los catalizadores basados en ceria-galia y Co; y (iv) las especies dicarbonilo geminales en  $\text{Cu}^{\delta+}$  ( $0 < \delta < 1$ ) fueron identificadas como la configuración activa responsable de la superior actividad para la oxidación de CO sobre delafosita de  $\text{CuGaO}_2$  reducida en comparación con su forma oxidada.

Estos hallazgos resaltan la solidez del marco IR+DFT para dilucidar mecanismos de reacción racionales, traduciendo la información espectroscópica en una representación precisa de la función catalítica.