

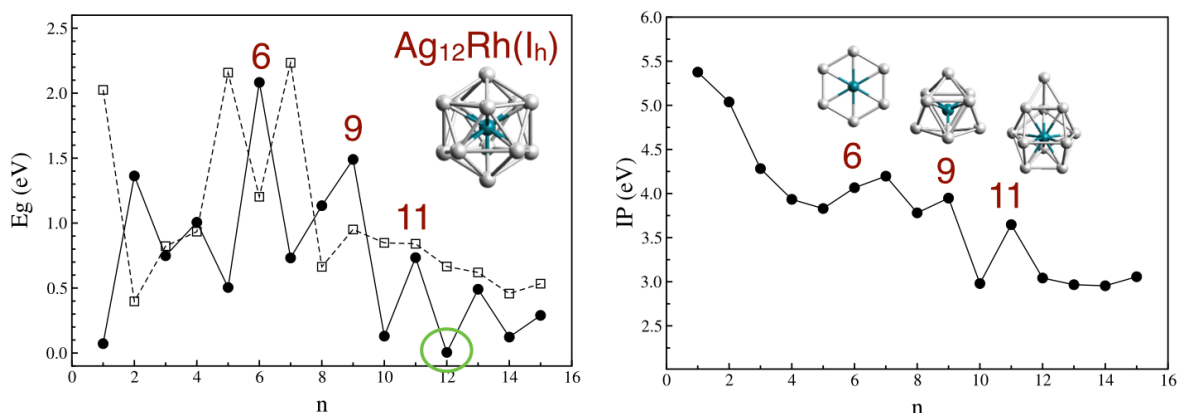
## Estructura y estabilidad de cúmulos de $\text{Ag}_n\text{Rh}$ ( $n=1-15$ )

Peter Ludwig Rodríguez<sup>1</sup>, Gabriel Merino<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Centro de Investigación y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Cinvestav  
Unidad Mérida; México.

[peter.rodriguez@cinvestav.com](mailto:peter.rodriguez@cinvestav.com)

Los cúmulos de  $\text{Ag}_n$  se emplean ampliamente en catálisis y óptica.<sup>1,2</sup> Recientemente, se ha encontrado que la plata puede catalizar la reducción de óxidos de nitrógeno que son los principales contaminantes emitidos por los automóviles.<sup>3,4</sup>



En el presente trabajo exploramos la superficie de energía potencial de los cúmulos de  $\text{Ag}_n$  descrita por la teoría de las funcionales de la densidad a un nivel PBE0/def2-TZVP, para localizar las estructuras más estables que adoptan estos sistemas cuando son dopados con una impureza de Rh. Nuestros resultados muestran que los cúmulos dopados adoptan estructuras más compactas y la impureza de Rh se localiza en el sitio de mayor coordinación. La estabilidad de estos cúmulos se puede explicar mediante llenado de capas electrónicas. Por ejemplo,  $\text{Ag}_9\text{Rh}$  y  $\text{Ag}_{11}\text{Rh}$  corresponden a sistemas de 18 y 20 electrones. De la misma forma, el llenado de una nueva capa genera una baja estabilidad química en estos sistemas, como la estructura  $\text{Ag}_{12}\text{Rh}(I_h)$ , que posee una reactividad especial.

<sup>1</sup>Shimizu, K.; Miyamoto Y.; Satsuma, A.; J. Catal. 2010, 270, 86-94.

<sup>2</sup>Udaya Bhaskara Rao T.; Pradeep T.; Angew. Chem. 2010, 122, 4017-4021.

<sup>3</sup>Sazama P.; apek L.; Drobn H.; Sobalk Z; Ddeek J.; Arve K.; Wichterlova B.; J. Catal. 2005, 232, 302-317.

<sup>4</sup>Breen J. P.; Burch R.; Hardacre C.; Hill C. J.; J. Phys. Chem. B. 2015, 109, 4805-4807.