



## ESTUDIO PRELIMINAR DE LA ESTABILIDAD DE CÚMULOS $Au_mIr_n$ ( $M+N = 4$ )

Delmi Guadalupe Cabrera-Aragón,<sup>1</sup> Sandy María Pacheco-Ortín,<sup>1</sup> Esther Agacino-Valdés<sup>1,2</sup>,  
Departamento de Ciencias Químicas<sup>1</sup>, Centro de Investigaciones Teóricas<sup>2</sup> Facultad de Estudios  
Superiores Cuautitlán, Universidad Nacional Autónoma de México, Campo 1, Cuautitlán Izcalli  
54740, Estado de México.  
[spachecopos@gmail.com](mailto:spachecopos@gmail.com)

Los convertidores catalíticos han sido una solución ingeniosa para abatir los gases contaminantes que emergen del escape de los vehículos automotores, por lo cual la búsqueda de nuevos sistemas catalíticos bimetálicos ha sido una línea de investigación importante lo cual se traduce en buscar sistemas cada vez más eficientes, selectivos y específicos para ser utilizados en estos dispositivos.

Este trabajo explora la actividad catalítica de cúmulos bimetálicos Au/Ir para la oxidación del CO, uno de los principales gases contaminantes del aire. Aunque el Au era considerado como el catalizador menos activo de los metales de transición, con los trabajos de Haruta [1] aumentó su interés, al encontrarse que nanopartículas de Au soportadas sobre ciertos óxidos metálicos, mostraban una elevada actividad catalítica en muchos procesos químicos. Por otra parte, los sistemas bimetálicos Au-M han sido también muy estudiados, por exhibir una importante actividad catalítica, resultado de un efecto sinérgico entre ambos metales [2].

Los cálculos se realizaron con el formalismo de la TFD, utilizando el funcional PBE, y una base TZVP dentro del código de Amsterdam Density Functional (ADF); asimismo se incluyó la aproximación ZORA para considerar el efecto relativista. En la modelación del proceso de oxidación del CO se utilizó un cúmulo de  $Au_nIr_m$  para  $n=0-4$  y  $m=0-4$ , cumpliéndose siempre que  $n + m = 4$ . Para cada combinación  $(n,m)$  fueron considerados las posibles multiplicidades, escogiéndose las más estables de cada una y a éstas, les fue acercada la molécula de  $O_2$  sobre posiciones claves: un átomo, una arista y una cara, considerando el Au, el Ir o combinaciones de ambos. Posteriormente se realizó el acercamiento del CO sobre el oxígeno más externo, de acuerdo a al mecanismo unimolecular de Eley-Rideal [3], el cual ya ha sido reportado para estos sistemas. Todas las geometrías consideradas fueron optimizadas de forma completa. En el trabajo se reportarán las energías de enlazamiento para los cúmulos libres, de adsorción del  $O_2$  y de oxidación del CO, para identificar la posible adsorción disociativa de la molécula de  $O_2$  y la posterior formación del  $CO_2$ . Para complementar los análisis se reportarán parámetros geométricos y de carga. Finalmente se reporta, la mejor combinación Au/Ir para la adsorción disociativa del  $O_2$  y la oxidación del CO.

### Referencias:

- [1] Haruta, M.; Tsubota, S.; Kobayashi, T.; Kageyama, H., Genet, M. J.; Delmon, B. J. *Catal.* **1993**, 144, 175-192
- [2] Schmid, G.; West, H.; Mehles, H.; Lehnert, A.; *Inorg. Chem.* **1997**, 36, 891-895
- [3] Mullins, C. B.; Rettner, C.T.; auerbach D. J.; *J. Chem. Phys.* **1991**, 95, 8649-8651.