



## ESTABILIZACIÓN DE NANOCLUSTERS DE PLATINO COMO CATALIZADORES

Elisa Jimenez-Izal<sup>1,2</sup>, Huanchen Zhai<sup>1</sup>, Mai-Anh Ha<sup>1</sup>, Anastassia N. Alexandrova<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry and Biochemistry, University of California—Los Angeles, 607 Charles E. Young Drive, Los Angeles, California 90095-1569, United States; <sup>2</sup>Kimika Fakultatea, Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU), and Donostia International Physics Center (DIPC), P. K. 1072, 20080 Donostia, Euskadi, Spain; <sup>3</sup>California NanoSystems Institute, Los Angeles, California 90095-1569, United States  
e-mail: [elisaji@ucla.edu](mailto:elisaji@ucla.edu)

Los catalizadores basados en nanopartículas metálicas ofrecen la posibilidad de explotar los recursos del planeta de manera más eficiente y minimizar los residuos, en pos de la sostenibilidad medioambiental. Este hecho, además, tiene un impacto económico sustancial, ya que de esta manera se reduce la cantidad de metales preciosos utilizados en la industria como catalizadores heterogéneos. El mayor problema, sin embargo, es la desactivación del catalizador, lo que conduce a una disminución de tanto su vida útil, como de su rendimiento. Dos principales procesos son los responsables de dicha desactivación. En primer lugar, la formación y acumulación de “coke”, depósitos que se acumulan en la superficie del catalizador y que conducen al envenenamiento de los “sitios activos”. En segundo lugar, los nanoclusters tienden a sinterizarse en partículas más grandes, con la consiguiente pérdida de los “sitios activos”. Nuestro objetivo es mitigar la desactivación de los nanoclusters de Pt depositados sobre óxidos, útiles para catalisis en la deshidrogenación de alcanos, a través de la comprensión y la manipulación de la estructura electrónica de tales catalizadores. Así, hemos analizado la influencia del tamaño y el dopado de los nanoclusters, y también el efecto del soporte óxido, en la estabilidad de estos nanoclusters metálicos. A partir de este estudio, proponemos alternativas para mitigar la desactivación de estos catalizadores por sinterizado y “coke”. Se presentarán además algunos métodos desarrollados en nuestro grupo para hacer posible estos estudios computacionales.