



Propiedades electrónicas del iridio soportado en montmorillonita

Claudia Briones¹, Yesenia Arredondo², Esther Agacino²

¹UNAM, ENES Unidad Morelia; México² UNAM, FES Cuautitlán; México

e-mail: brionesjurado@enesmorelia.unam

En las últimas dos décadas del siglo XX, los sistemas nanoestructurados y particularmente, las nanopartículas de metales, comenzaron a investigarse con gran entusiasmo por sus potenciales aplicaciones en áreas como catálisis, almacenamiento de datos y optoelectrónica. La eficiencia catalítica de estos sistemas nanométricos se atribuye a la mayor localización de los electrones que poseen y la posible interacción con el soporte sobre el cual se depositan. Un problema que frecuentemente presentan estos catalizadores es la agregación de las nanopartículas, lo cual disminuye o también puede dar lugar a sistemas con actividad catalítica nula. Al respecto, son notables los recientes reportes sobre la preparación de nanopartículas de iridio en donde utilizando soportes como γ - Al_2O_3 , MgO, TiO_2 , y zeolitas, se ha observado que su principal característica es una alta resistencia a la sinterización. En estos soportes se detalla su baja o prácticamente nula tendencia a coalescer. Así mismo, en estas síntesis se han encontrado especies monoatómicas de iridio lo cual es muy atractivo desde el punto de vista catalítico. En este trabajo, se propone el estudio de la interacción de iridio con un mineral arcilloso, la montmorillonita, que es un soporte amigable con el ambiente y de bajo costo. Por medio de cálculos con la teoría de los funcionales de la densidad implementada en *Quantum Espresso*, se obtienen la densidad de estados, las cargas de Löwdin, el momento magnético y la energía de interacción metal-soporte. Los resultados obtenidos permitirán establecer la posible utilización de la montmorillonita como soporte en la preparación de nanopartículas de Iridio; para ello se trabajará con cúmulos de Ir_n , para $n=1-4$.

1. Aydin, C.; Lu, J.; Browning, N. D.; Gates, B. C. *Angew Chemie Int Edit* **2012**, *51*, 5929-5934.
2. Lin, J.; Wang, A.; Qiao, B.; Liu, X.; Yang, X.; Wang, X.; Liang, J; Li, J.; Liu, J.; Zhang, T. *JACS* **2013**, *135*, 15314-15317.