

## Modelagem Molecular de Complexo de Nióbio com Guanidino e Oxalato Precursor da Síntese de Carbeto de Nióbio

Rene Pfeifer<sup>1</sup>(PG)\*, Victor Teixeira da Silva<sup>2</sup>(PQ), Alexandre B. Rocha<sup>1</sup>(PQ)

\*[renepfeifer18@yahoo.com.br](mailto:renepfeifer18@yahoo.com.br)

<sup>1</sup>Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, UFRJ, Avenida Athos da Silveira Ramos, 149, Bloco A, 304, 3ª andar, CEP 21941-909, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

<sup>2</sup>NUCAT/PEQ/COPPE/UFRJ, Caixa Postal 68502, CEP 21941-972, Rio de Janeiro, RJ, CEP 21949-900, Brasil.

Palavras Chave: CATALISE, CARBETOS, NIÓBIO, DFT, SBKJC, IV

### Introdução

Catalisadores a base de carbeto de molibdênio, tungstênio e nióbio têm sido bastante estudados nos últimos anos<sup>1</sup>, como alternativa aos metais do grupo da platina, em diversas reações tais como, hidrogenação de hidrocarbonetos, isomerização e hidrogenólise, devido a semelhança de suas propriedades catalíticas com a dos metais nobres.

Em relação aos metais do grupo da platina, estes materiais possuem a vantagem do menor custo e da maior tolerância a compostos sulfurados e nitrogenados, uma vez que apresentam atividade em reações típicas de sulfetos de metais de transição, como hidrossulfurização (HDS) e hidrodessnitrogenação (HDN).

Este trabalho tem por objetivo determinar, utilizando métodos quanto-mecânicos, uma provável estrutura do complexo precursor, formado na síntese do carbeto de nióbio, pelo método desenvolvido pelo NUCAT/COPPE/UFRJ.

A estrutura obtida será otimizada e caracterizada como um ponto de mínimo na superfície de energia potencial (SEP) do sistema. O espectro da estrutura final será então gerado e comparado com o espectro experimental obtido pelo NUCAT/COPPE/UFRJ.

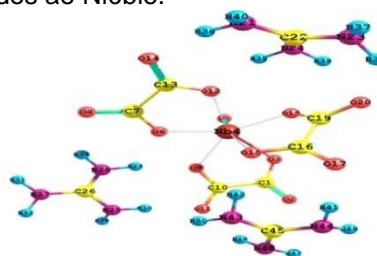
### Resultados e Discussão

As estruturas para os cálculos DFT foram geradas utilizando o programa Molden. Os cálculos foram realizados utilizando o programa Gamess 08<sup>2</sup>. Foram realizados cálculos de otimização de geometria e frequência, utilizando o funcional B3LYP, na base 6-31G\*, com o potencial efetivo SBKJC.

A provável estrutura para o complexo precursor foi obtida, ligando-se inicialmente o átomo de nióbio (no estado de oxidação IV), a um ânion oxalato e um guanidino por vez. A principal estrutura gerada (Figura 1) possuía carga total zero e multiplicidade 1, o que se espera-se que descreva o sistema corretamente.

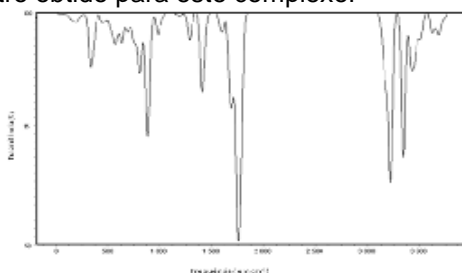
O ânion oxalato foi coordenado ao nióbio pelos dois átomos de oxigênio não protonados, que possuem um par de elétrons isolado, que podem formar uma ligação com o Nióbio. Já no caso do guanidino, este foi disposto de modo a gerar uma

interação intermolecular entre os hidrogênios presentes em sua estrutura e os oxigênios não coordenados ao Nióbio.



**Figura 1:** Estrutura otimizada do precursor de carbeto de Nióbio.

A partir da estrutura otimizada do complexo de Nióbio, foram calculadas todas as suas frequências e um espectro na região do Infravermelho (IV) foi gerado. A figura 2 mostra o espectro obtido para este complexo.



**Figura 2:** Espectro na região do Infravermelho gerado para o precursor de carbeto de Nióbio.

### Conclusões

Com base nos resultados obtidos, pode-se concluir que um nível de cálculo DFT, utilizando o funcional B3LYP, na base 6-31G para átomos leves e com o potencial efetivo SBKJC para o nióbio, nos fornece uma boa descrição do sistema em estudo. O espectro de Infravermelho gerado apresenta comportamento qualitativo semelhante ao precursor obtido experimentalmente.

### Agradecimentos

Agradecemos à FAPERJ e ao CNPq pelo apoio concedido para a realização deste trabalho.

<sup>1</sup>Rocha, Angela Sanches, Tese de Doutorado, *Hidrogenação de Benzeno em catalisadores à base de Molibdênio Carburado Suportado em Zeólitas Y*, UFRJ/DFQ/IQ, Rio de Janeiro, Agosto, **2004**.

<sup>2</sup>GAMESS 08 - M.W.Schmidt, K.K.Baldrige, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, et al, *J.Comput.Chem.* **1993**, 14, 1347-1363.