

# Incorporação de hidrogênio em carbeto de molibidênio, um estudo teórico.

Ricardo R. de Oliveira Junior (PG)\*<sup>1</sup>, Alexandre B. da Rocha (PQ)<sup>1</sup>

[rrodrigues.iq@gmail.com](mailto:rrodrigues.iq@gmail.com)

<sup>1</sup>Instituto de Química da UFRJ, Departamento de Físico-Química

Palavras Chave: Carbeto de molibidênio, incorporação de hidrogênio, estado sólido

## Introdução

Carbetos de metais de transição vem sendo empregados como catalisadores na hidrogenação de hidrocarbonetos como uma alternativa ao uso de metais do grupo da Platina<sup>1</sup>.

Carbeto de molibidênio (Mo<sub>2</sub>C) apresentou apreciável desempenho na hidrogenação de benzeno quando comparado com metais de transição. O carbeto suportado em zeólita Y apresenta alta atividade para hidrogenação de benzeno em baixas temperaturas e pressões<sup>2,3</sup>. Porém após aproximadamente 2 horas o catalisador é desativado. Recentemente foi demonstrado que a desativação é causada pela adsorção irreversível de benzeno desde que não haja mais hidrogênio na superfície<sup>3</sup>.

O mecanismo de catalise não é completamente entendido. O objetivo desse trabalho é compreender a forma que o hidrogênio é incorporado no carbeto de molibidênio. Para isso cálculos DFT foram realizados com o funcional PBE de troca e correlação, com base de ondas planas com pseudo-potencial para Mo<sub>2</sub>C ortorrômbico. Todos os cálculos foram realizados no código PWscf implementado no pacote de programas ESPRESSO<sup>4</sup>.

## Resultados e Discussão

A análise termodinâmica foi realizada para um sistema composto apenas pelo bulk e outro sistema contendo a superfície. A energia do sistema com hidrogênio foi subtraída da energia do sistema e dos átomos de hidrogênio separadamente:

$$\Delta E = E_{bulk+h} - (E_{bulk} + NE_H)$$

Para o sistema considerando a superfície:

$$\Delta E = E_{Mo_2C+H} - (E_{Mo_2C} + NE_H)$$

Tabela 1. Resultados para o bulk

N(H)	ΔE (Kcal/mol)	ΔE (Kcal/mol) Normalized
0	0	-
1	16,9	16,9
2	33,7	16,8
3	40,4	13,5
4	25,1	6,3
5	53,5	10,7
6	60,6	10,1
7	83,8	12,0
8	102,8	12,9
9	125,1	13,9
10	147,4	14,7
11	166,0	15,1
12	172,8	14,4

Tabela 2. Resultados para o sistema considerando a superfície

N (H)	ΔE (Kcal/mol)	ΔE (Kcal/mol) Normalized
0	0	-
9	-103,2	-11,5
10	-103,5	-10,3
11	-	-
12	-97,1	-8,1
13	-89,2	-6,9
14	-57,7	-4,1
15	-50,2	-3,3
16	-28,7	-1,8

## Conclusões

Os resultados indicam que a absorção não é favorável, porém a absorção com a adsorção são favoráveis.

## Agradecimentos

CNPq, CAPES e FAPERJ.

<sup>1</sup>OYAMA, S. T., Catal. Today, v.15, n.2 p. 179–200, 1992.

<sup>2</sup>ROCHA, A. S., SILVA, V. T. da, FARO JR., A. C., Appl. Catal. A v.314, n.2, p. 137–147, 2006.

<sup>3</sup>ROCHA, A. S., ROCHA, A. B., SILVA, V. T. da, Appl. Catal. A, v.379, n.1, p. 54-60, 2010.

5 - GIANNOZZI, P. et. al, J. Phys. Condes. Mater., v.21, p. 395502-395521, 2009.