

Estudio teórico de la Hidrodesulfuración del Tiofeno sobre nanoclusters de MoS₂ reducidos

Huck, Valentín Lucio¹; Del Plá, Julián¹; Pis Diez, Reinaldo^{1,2}; Richard, Diego^{1,3}

¹ Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina

² CEQUINOR, La Plata, Argentina

³ CETMIC, La Plata, Argentina

huck.valentinl@gmail.com

Área temática: G. Aplicaciones de nanomateriales en ambiente, energía, agro, alimentos y catálisis

La eliminación de azufre de las fracciones de petróleo es un proceso industrial crítico impulsado por regulaciones ambientales estrictas, las cuales exigen que los niveles de azufre en combustibles sean inferiores a 10 ppm. Los óxidos de azufre (SO_x) generados durante la combustión contribuyen a la lluvia ácida y presentan riesgos significativos tanto para la estabilidad del ecosistema como para la salud humana. Mas allá de las preocupaciones ambientales, las especies de azufre actúan como potentes venenos para los catalizadores utilizados en etapas posteriores del refinamiento de combustibles. Si bien el disulfuro de molibdeno (MoS₂) es el pilar de la hidrodesulfuración (HDS) industrial, una comprensión atomística profunda de la reactividad intrínseca de los bordes MoS₂ no promovidos sigue siendo esencial para desarrollar la próxima generación de catalizadores de alta eficiencia [1,2].

El estudio explora la vía de “Desulfuración Directa” (DDS), investigando el panorama energético de la disociación de H₂ y la desulfuración completa del tiofeno [1].

Para capturar la compleja química del catalizador, utilizamos la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) y el método “*Nudged Elastic Band*” (NEB) [3] para explorar las barreras de reacción de cada paso del mecanismo. El catalizador fue representado por un nanocluster reducido de Mo₁₈S₃₂. La elección de esta morfología de “triángulo truncado” se basó en la evidencia experimental y teórica, que muestra que las nanopartículas de MoS₂ exponen diferentes tipos de sitios de borde y de esquina [1] con actividad catalítica. El tamaño de este nanocluster se seleccionó para proporcionar una representación precisa de la heterogeneidad de sitios que se encuentra en los catalizadores reales, manteniendo al mismo tiempo la viabilidad computacional.

Primero se estudió la activación del hidrógeno molecular adsorbido en el catalizador. Nuestro análisis muestra que la superficie de MoS₂ no presenta una actividad homogénea; por el contrario, la activación de H₂ es un proceso altamente específico del sitio, donde los sitios de las esquinas muestran ventajas energéticas distintivas. Finalmente, el trabajo caracteriza las barreras de energía para el ciclo completo de la HDS, detallando la transformación del tiofeno en hidrocarburos libres de azufre y H₂S.

REFERENCIAS

1. Salazar, N., Rangarajan, S., Rodriguez-Fernandez, J., Mavrikakis, M., & Lauritsen, J. V. *Nature Communications*, 11 (2020) 4369
2. Šarić, M., Rossmeisl, J., Moses, P. G. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19 (2017) 2017-2024
3. Henkelman, G., et al. *J. Chem. Phys.* 113 (2000) 9901