

# ESTUDIO TEÓRICO DE LA GENERACIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR DE METANOL COMPARANDO DISTINTOS CLUSTERS METÁLICOS (Fe,Ru,Os,Co,Rh,Ir,Ni,Pd,Pt,Cu,Ag,Au,Zn,Cd,Hg,)

Lazaro J. YAMIN<sup>1</sup>, Marta B. SANTILLAN<sup>1</sup>, Luis A. ARRUA<sup>1,2</sup>

1- Departamento de Química. Fac. de Química, Bioquímica y Farmacia - UNSL -  
2.-Inst. de Investigaciones en Tecnología Química - INTEQUI - (UNSL-CONICET)  
Chacabuco y Pedernera, (5700) San Luis, Argentina. E-mail: ljayamin@unsl.edu.ar

## Introducción

La descomposición catalítica de metanol es una alternativa para la obtención de hidrógeno que ha sido estudiada sobre distintos sistemas metálicos. En particular en nuestro grupo se han llevado a cabo estudios experimentales utilizando como catalizador cobre metálico soportado [1,2] y también a nivel teórico [3] sobre un cluster optimizado de cobre. En el presente trabajo se extiende el estudio teórico a otros metales como Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ir, Zn, Cd, Hg, con el sistema Gaussian 98 [4], mediante el método de la teoría del funcional de la densidad (DFT) con los funcionales híbridos B3LYP, utilizando conjuntos base de pseudopotenciales LANL2DZ. Similarmente en congresos se presentaron Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt. [5].

## Resultados

Para realizar el estudio se planteó: a) Optimización de geometría de los clusters metálicos correspondientes de un tamaño acorde a la capacidad de cálculo y de la molécula reactiva (i). b) Estudio de los diferentes pasos de la interacción de metanol con el catalizador: Adsorción de metanol (ii), desprendimiento del hidrógeno alcohólico (iii), desprendimiento de hidrógeno de metilo (iv), liberación de la molécula de hidrógeno (v). desorción de H<sub>2</sub> (vi). Los valores de energía electrónica relativa se muestran en la tabla; excepto de Zn, Cd, Hg, que no mostraron convergencia:

	(i) *	(ii) *	(iii) *	(iv) *	(v) *	(vi) *
	CH <sub>3</sub> OH + Me <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> OH -Me <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> O -Me <sub>3</sub> -H	CH <sub>2</sub> O -Me <sub>3</sub> -2H	CH <sub>2</sub> O -Me <sub>3</sub> -H <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> O -Me <sub>3</sub> ; H <sub>2</sub>
Fe	0	-4.7	-12.6	-12.9	-7.1	-6.5
Ru	0	-3.2	-7.6	-7.8	-6.6	+0.8
Os	0	-12.0	-14.8	-19.4	-17.4	-10.4
Co	0	-8.9	-13.2	-11.9	-6.5	-9.3
Rh	0	-2.3	-2.5	-3.3	+0.5	+10.3
Ir	0	-6.0	-9.4	-9.7	-7.0	-2.9

\* (Hartree/partícula) x 10<sup>2</sup>; Me: Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ir.

## Conclusión

Ordenando en base a las estabilidades relativas calculadas, el proceso de liberación de hidrógeno a partir de metanol más adecuado sería el que utiliza como catalizador: Pt; Os; Ni; Co; Fe; Ir; > Cu; Rh; Ru; Pd; Ag; Au.

## Referencias

- [1] -D.Guerreiro, O.Gorriz, J. Rivarola and L. Arrúa. App. Cat.A:Gen.165(1997)259-271.
- [2] -D.Guerreiro, O.Gorriz, G. Larsen, L. Arrúa App. Cat.A:Gen., 204 (2000) 33-48.
- [3]-L.Yamín, M.Gómez, L.Arrúa. J.Mol. Struc.(Theochem), Vol 684/1-3 (2004) 159-164.
- [4] -J.A. Pople et al., Gaussian 98, Revision A.7, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.
- [5] -XXVIII Cong. Química; XVI Cong. Fisicoquímica y Química Inorgánica.