



## ESTUDIO TEÓRICO DE LA HIDRODESULFURIZACIÓN DEL TIOFENO SOBRE NANOCLÚSTERS DE $\text{MoS}_2$ REDUCIDOS

**Valentin Huck,<sup>1</sup> Julián Del Plá,<sup>2</sup> Diego Richard,<sup>2</sup> Reinaldo Pis Diez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Cequinor (UNLP-CONICET), Boulevard 120 N°1465, La Plata, Buenos Aires, Argentina; <sup>2</sup> CETMIC (UNLP-CIC-CONICET), Camino Parque Centenario y 506, Manuel B. Gonnez, Buenos Aires, Argentina.

Correo electrónico de contacto: [huck.valentinl@gmail.com](mailto:huck.valentinl@gmail.com)

La eliminación de azufre de las fracciones de petróleo es un proceso industrial crítico impulsado por regulaciones ambientales estrictas y para evitar la formación de especies derivadas del azufre que actúan como potentes venenos para catalizadores utilizados en etapas posteriores del refinamiento de combustibles. Si bien el disulfuro de molibdeno ( $\text{MoS}_2$ ) es el pilar de la hidrodesulfurización (HDS) industrial, una comprensión atomística profunda de la reactividad intrínseca de los bordes  $\text{MoS}_2$  no promovidos sigue siendo esencial para desarrollar la próxima generación de catalizadores de alta eficiencia [1, 2].

Este estudio explora la vía de “Desulfurización Directa” (DDS), investigando en panorama energético de la disociación del  $\text{H}_2$  y la posterior desulfurización 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  $\text{Mo}_{18}\text{S}_{32}$ , de morfología de “triángulo truncado” basada en la evidencia experimental y teórica establecida, que muestra que las nanopartículas de  $\text{MoS}_2$  exponen diferentes tipos de sitios de borde y de esquina con actividad catalítica [1]. Primero se estudió la activación del hidrógeno molecular adsorbido en el catalizador. Nuestro análisis muestra que la superficie de  $\text{MoS}_2$  no es uniformemente activa; la activación de  $\text{H}_2$  es un proceso altamente específico del sitio, siendo los sitios de esquina los que muestran las mejores ventajas energéticas. De la misma forma se estudió la adsorción de la molécula de tiofeno, como modelo de hidrocarburo sulfurado. Finalmente, el trabajo caracteriza las barreras de energía para el ciclo completo de la DDS, detallando la transformación del tiofeno en hidrocarburos libres de azufre y  $\text{H}_2\text{S}$ .

### REFERENCIAS

1. Salazar, N.; Rangarajan, S.; Rodriguez-Fernandez, J.; Mavrikakis, M.; Lauritsen, J. V. *Nat. Commun.* **2020**, *11*, 4369. DOI: [10.1038/s41467-020-18183-4](https://doi.org/10.1038/s41467-020-18183-4)
2. Šarić, M.; Rossmeisl, J.; Moses, P. G. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, *19* (3), 2017–2024. DOI: [10.1039/c6cp06881b](https://doi.org/10.1039/c6cp06881b)
3. Henkelman, G.; Uberuaga, B. P.; Jónsson, H. *J. Chem. Phys.* **2000**, *113* (22), 9901–9904. DOI: [10.1063/1.1329672](https://doi.org/10.1063/1.1329672)