

Título de la Tesis: “Estudio por métodos teóricos del trióxido de Molibdeno como catalizador de deshidrogenación”

Magister en Ingeniería Química

Autor: Irigoyen, Beatriz del Luján

Directores: Dr. Norberto Castellani - Dr. Alfredo Juan

Resumen

En esta tesis se han estudiado las interacciones del metano sobre la superficie (100) del MoO_3 . La energía total para las especies moleculares o fragmentos ha sido calculada utilizando una metodología basada en la teoría ASIED-MO (Atom Superposition and Electron Delocalization - Molecular Orbital). Los resultados fueron obtenidos utilizando el modelo de racimo $\text{Mo}_{30}\text{O}_{107}^{36}$.

Fueron exploradas diferentes secuencias y sitios para la abstracción de H del metano, sobre las capas exponiendo átomos de molibdeno y átomos de oxígeno. También se analizaron la coordinación del oxígeno y los arreglos geométricos de las especies adsorbidas. El proceso resultó endotérmico.

También se investigó la formación de productos oxigenados, tales como: CH_2O , CO y CO_2 .