

INTERAÇÃO DE ÁTOMOS LEVES COM CLUSTERS DE METAIS DE TRANSIÇÃO

Eduardo Pires Cassús*

CENPES – Petrobras, Av. Horácio de Macedo, 950, 21941-915 Rio de Janeiro - RJ, Brasil

Sérgio de Paula Machado, Francisco M.S. Garrido, Marta E. Medeiros e Juan Omar Machuca-Herrera

Departamento de Química Inorgânica, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, CP 68563, 21945-970 Rio de Janeiro - RJ, Brasil

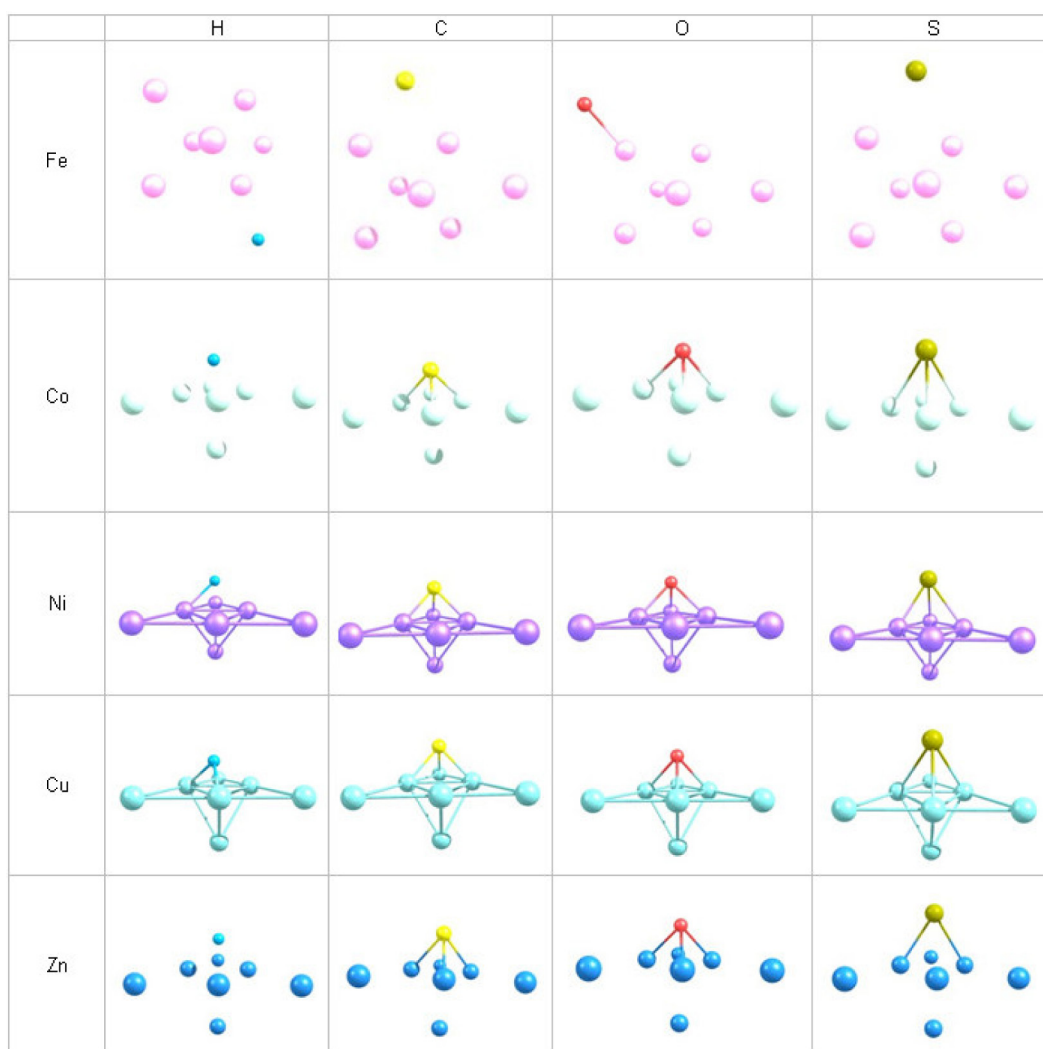


Figura 1S. Geometrias obtidas para a adsorção de átomos de H, C, O e S sobre clusters de ferro, cobalto, níquel, cobre e zinco usando-se o funcional híbrido B3LYP

*e-mail: cassus@petrobras.com.br

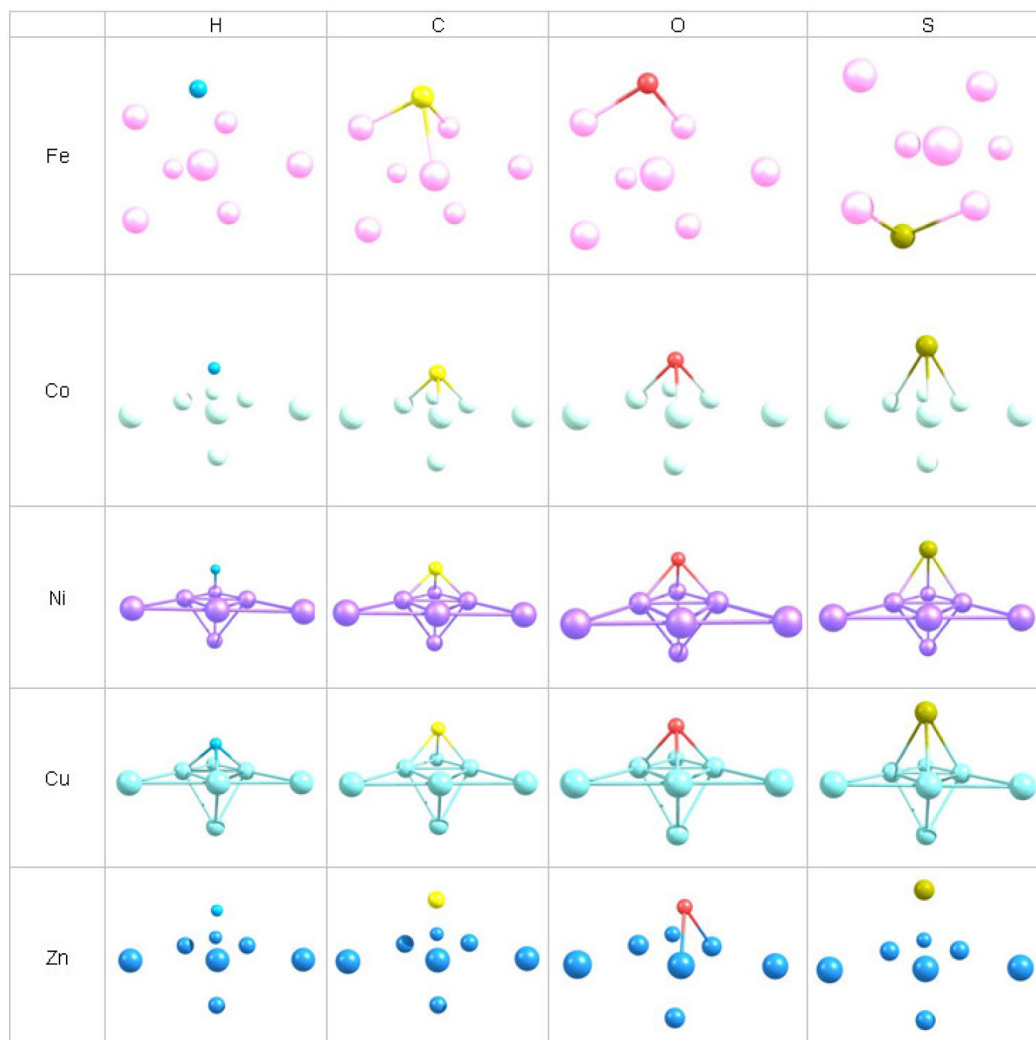


Figura 2S. Geometrias obtidas para a adsorção de átomos de H, C, O e S sobre clusters de ferro, cobalto, níquel, cobre e zinco usando-se o funcional XPBE96