Estudo teórico da adsorção de gás de síntese em MgO e ZnO

*Rogério J. Costa¹(PG), Elton A. S. Castro²(PQ), João B. L. Martins¹(PQ).

rogerquim@gmail.com

¹Universidade de Brasília

²Universidade Estadual de Goiás

RESUMO

O estudo das reações químicas de superfícies tem se mostrado de interesse para muitas áreas da ciência e setores ligados a indústria, saúde pública, meio ambiente e também na busca de fontes de energia alternativa. A reatividade pode ser compreendida no processo de adsorção envolvendo adsorventes e adsorbatos, onde diversas informações podem ser obtidas por estudos químico computacionais. A separação de gases oxigênio, hidrogênio, monóxido de carbono, dióxido de carbono e água podem ser alcançadas com o uso de catalisadores a base de óxido de magnésio e de óxido de zinco. Neste trabalho teórico, foram realizados cálculos mecânico-quânticos com modelos envolvendo as interações de gás de síntese com as superfícies de MgO e ZnO em que propriedades eletrônicas e estruturais destas interações serão apresentadas e discutidas.

Palavras-chave: Adsorção. MgO. ZnO. Gás de síntese.

1 Introdução

A evolução da sociedade moderna vem dependendo da disponibilidade de recursos energéticos e uma multiplicidade de produtos químicos. As reservas fósseis tem fornecido ao longo dos anos uma considerável quantidade de matéria-prima, as quais são indispensáveis para a manutenção da vida humana. As pesquisas em catálise heterogênea envolvendo o processo de adsorção em superfícies de óxidos metálicos como o óxido de magnésio e o óxido de zinco tem sido intensa devido à sua potencial aplicação em processos ocorridos no meio ambiente.¹

A separação de gases, do chamado gás de síntese, como o hidrogênio (H₂), oxigênio (O₂), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂) e água (H₂O) são amplamente realizadas por catalisadores a base de óxidos como o óxido de magnésio (MgO) e o óxido de zinco (ZnO).^{2,3} A identificação e separação destas moléculas são de extrema importância, uma vez que o uso de reagentes com elevado grau de pureza é de grande valia para a qualidade dos produtos e materiais fabricados nas indústrias em geral. Em procedimentos hospitalares o O₂ é fundamental e, por outro lado, o CO e o CO₂ em elevada proporção pode ser extremamente prejudicial ao ser humano e ao meio ambiente.^{4,5}

2 Metodologia

Foram utilizados métodos UFF, PM6 e DFT com os funcionais B3LYP, com as funções de base 6-31+G(d) e 6-31+G(d,p) aplicados em conjunto no método híbrido ONIOM (*Our own Nlayered Integrated molecular Orbital and molecular Mechanics*). Este é sofisticado método que possui como uma das principais características a possibilidade de trabalhar-se com sistemas de grande tamanho utilizando diferentes métodos de teorias em diferentes locais da estrutura. A otimização visou o relaxamento de centros pentacoordenados no MgO (Figura 1-b) e hexágonos no ZnO (Figura 1-d) com os gases do gás de síntese.

Figura 1. Modelos de MgO e ZnO com destaque para os centros penta-coordenados (b) e hexágonos (d).

3 Resultados e Discussão

As energias de ligações foram calculadas através das diferenças das energias totais dos complexos otimizados e suas respectivas partes isoladas e otimizadas dispostas para os grupos de modelos calculados com ONIOM, bem como frequências calculadas após o processo de otimização. Distâncias, ângulos e outras informações de geometrias também foram analisados.

4 Considerações Finais

Os níveis teóricos utilizados para os cálculos dos complexos de MgO/Gás de síntese e ZnO/Gás de síntese próximos aos centros penta-coordenados e hexágonos tem se mostrado eficientes com resultados de geometrias e energias próximos de trabalhos teóricos e experimentais da literatura. O método ONIOM(PM6:UFF) vem mostrando tendências de aumento de energias de ligação com o aumento de centros da camada alta liberados para otimização e pares de átomos no hexágono central do ZnO, bem como as geometrias das moléculas de gases nas superfícies estão em concordância com dados teóricos e experimentais.

Agradecimentos

FAPDF, CNPq, CAPES

Referências

- [1] Y. Xu, J. Li, Y. Zhang, W. Chen. Surface science, vol. 525, no. 1, pp. 13–23, 2003.
- [2] D. Rethwisch, J. Dumesic. Applied catalysis, vol. 21, no. 1, pp. 97–109, 1986.
- [3] Ü. Özgür, Y. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. Reshchikov, S. Dogan, V. Avrutin, S.-J. Cho, H. Morkoc. Journal of applied physics, vol. 98, no. 4, p. 11, 2005.
- [4] M. J. Gradassi, N. W. Green Fuel Processing Technology, vol. 42, no. 2-3, pp. 65–83, 1995.
- [5] O. Karalti, D. Alfe, M. J. Gillan, K. D. Jordan. Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 14, no. 21, pp. 7846–7853, 2012.