

Simulação Computacional de Materiais Híbridos Absorvedores de Gases

Bruna L. de Carvalho Cunha (IC), Leonardo José A. de Siqueira (PQ)

Laboratório de Materiais Híbridos, ICAQF, Universidade Federal de São Paulo - Campus Diadema.

Palavras Chave: SO₂, argila, PEO, Absorção.

Introdução

O dióxido de enxofre, SO₂, quando presente na atmosfera, pode causar o fenômeno da chuva ácida. Apesar de existirem métodos químicos capazes de absorver SO₂, o uso de argilas, por exemplo, a Montmorilonita (MMT), vem sendo investigado para este fim. Experimentos realizados com a MMT modificada com o cátion hexadeciltrimetilamônio mostraram que a argila modificada é capaz de absorver três vezes mais SO₂ que a MMT sódica.¹ O poli(óxido etileno) (PEO) são capazes de absorver SO₂. Adicionalmente, este polímero pode formar híbrido a partir da intercalação com MMT. Neste trabalho realizamos um estudo computacional para avaliar a capacidade de absorção de SO₂ de materiais híbridos formados pela intercalação de PEO nas argilas MMT sódica e modificada com o cátion trimetil-butilamônio.

Resultados e Discussão

As simulações de dinâmica molecular foram realizadas com o programa DLPOLY, utilizando campos de forças previamente usados em nosso grupo.^{2,3}

O espaçamento basal obtido na simulação de PEO confinado na MMT sódica foi de 20Å. Para efeito de comparação, dados de difração de raios-X mostram um espaçamento de 18 Å,⁴ estando de acordo com o dado obtido da simulação.

A Figura 1 ilustra o comportamento da energia de inchamento da MMT em função da quantidade de SO₂ e H₂O no espaço interlamelar.³ Os resultados de nossas simulações mostram que a inserção de SO₂ no espaço interlamelar tanto do material híbrido formado por PEO e MMT modificada e MMT sódica é energeticamente favorável. Experimentalmente, a esfoliação do híbrido MMT-Na-PEO pode ser obtida em água, em que o espaçamento lamelar aumenta devido à solvatação do Na⁺, MMT e PEO em água. Desta forma, o perfil de energia de inchamento do híbrido em água obtido a partir das simulações deve apresentar valores negativos. De fato, na 38ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Figura 1 pode ser observado um perfil com energia de inchamento em água com valores negativos. Como os perfis de energia de inchamento de SO₂ também são negativos, as simulações indicam que os híbridos de MMT-PEO são capazes de absorver SO₂.

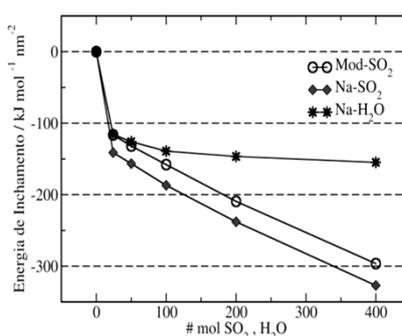


Figura 1. Energias de Inchamento por número de SO₂ para sistema com argila sódica e modificada.

A análise estrutural dos híbridos mostra que as cadeias de PEO se organizam em camadas no espaço interlamelar. As moléculas de SO₂ e H₂O se concentram majoritariamente próximos à superfície da lamela, assim como os cátions Na⁺ e quaternário de amônio. Também foi possível observar que moléculas de SO₂ e H₂O ocupam regiões onde existem camadas de polímero, evidenciando a solvatação destas pelo PEO.

Conclusões

Perfis de energia de inchamento de SO₂ sugerem que os híbridos são capazes de absorver o gás. As moléculas de SO₂ se concentram próximos às lamelas e o PEO se organiza em camadas no espaço interlamelar.

Agradecimentos

FAPESP, CNPq, UNIFESP.

¹ J. L. Venaruzzo, C. Volzone, M.L. Rueda, J. Ortega, *Microporous and Mesoporous Mat.* **2002**, 56, 73.

² J. D. Morganti, K. Hoher, M. C. C. Ribeiro, R. A. Ando, L. J. A. Siqueira, *J. Phys. Chem. C* **2014**, doi: 10.1021/jp505853k.

³ D. Duarte, M. Salanne, B. Rotenberg, M. A. Bizeto, L. J. A. Siqueira, *J. Phys.: Condens. Matter* **2014**, 26, 284107.

⁴ P. C. Lombardo, Al L. Poli, M. G. Neumann, D. S. Machado, C. C. Schmitt, *J. Appl. Polym. Sci.* **2013**, 127,3687.