

Caracterização dos sítios ácidos no catalisador bifuncional CuO-ZnO/HY por espectroscopia na região infravermelho.

Jhonny O. Huertas (PG), Maria Isabel Pais da Silva (PQ)*. isapais@rdc.puc-rio.br.

Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro, PUC-Rio, Departamento de Química, Rua Marquês de São Vicente 225, Gávea, Rio de Janeiro, RJ, CEP: 22453-900 Brasil).

Palavras Chave: Catalisador bifuncional, infravermelho, acidez.

Introdução

Catalisadores bifuncionais são constituídos por dois componentes e catalisam mais de uma reação num diferente sítio ativo. O sistema CuO-ZnO/HY, teve interessantes resultados na síntese de hidrocarbonetos a partir do gás de síntese. Neste sistema, a acidez da zeólita se vê afetada pela mistura de óxidos. Para estudar a influência destes óxidos na acidez, tem sido empregada a técnica de infravermelho com o uso de moléculas-sonda. Entre estas moléculas, a piridina como uma base forte é capaz de interagir com os sítios ácidos de Bronsted e de Lewis e é muito aplicada, mas, moléculas menores, como a d_3 -acetoneitrila, são capazes de atingir lugares pouco acessíveis para as outras¹. Neste trabalho três catalisadores bifuncionais preparados por diferentes métodos foram estudados por espectroscopia na região do infravermelho usando a piridina e a d_3 -acetoneitrila (CD_3CN) como moléculas-sonda. Para avaliar os resultados foi tomado também um espectro da zeólita HY de partida.

Resultados e Discussão

Na zeólita HY com piridina adsorvida foram encontradas bandas em 1543 cm^{-1} e 1444 cm^{-1} dos sítios ácidos de Bronsted e Lewis respectivamente, além de bandas correspondentes a sítios de Bronsted mais Lewis², figura 1 (acima). Já com CD_3CN adsorvida foram encontradas três bandas em 2320 cm^{-1} , 2275 cm^{-1} e 2110 cm^{-1} correspondentes³ aos sítios ácidos de Lewis, aos grupos silanois e ao estiramento assimétrico do CD fisissorvido, respectivamente, sendo que por decomposição dos espectros os sítios ácidos de Bronsted são encontrados em 2298 cm^{-1} , figura 1 (embaixo).

Uma diminuição nas bandas é observada em todos os catalisadores bifuncionais quando a piridina foi adsorvida encontrando-se picos correspondentes aos sítios ácidos de Lewis em 1444 cm^{-1} e Lewis mais Bronsted em 1488 cm^{-1} e 1596 cm^{-1} . Uma pequena banda correspondente aos sítios ácidos de Bronsted foi observada em 1543 cm^{-1} no catalisador preparado por precipitação-deposição (pre-dep).

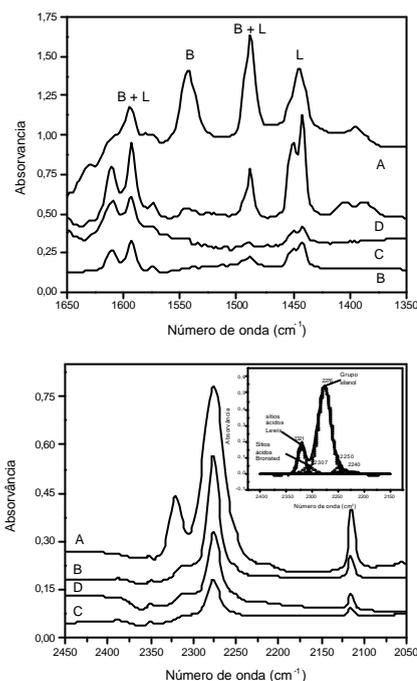


Figura 1. Espectro infravermelho usando piridina (acima) e CD_3CN (embaixo). (A) HY, catalisador bifuncional preparado pelos métodos (B) cop-sed, (C) cop-imp e (D) pre-dep.

Com CD_3CN adsorvida as bandas pertencentes aos grupos silanois são principalmente observadas sendo mais intensas no catalisador preparado por coprecipitação-sedimentação (cop-sed). Ombros correspondentes aos sítios ácidos de Bronsted também são observados.

Conclusões

Nos catalisadores bifuncionais CuO-ZnO/HY os sítios ácidos diminuem. Na zeólita HY os sítios ácidos de Lewis e Bronsted são melhor identificados com a piridina. Nos catalisadores bifuncionais os sítios ácidos de Lewis são melhor identificados com piridina e os sítios ácidos de Bronsted com d_3 -acetoneitrila.

¹ Wichterlová B., Tvaruzkova Z., Sobalik Z., Sarv P. *Microporous and Mesoporous Materials*, **1998**, 24 223-233.

² Pais da Silva, Lins da Silva F. Tellez C. A. *Spectrochimica Acta Part A*: **2002**, 58, 3159-3166.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

³ Kung H. H., Babitz S.M., Willians B. A., Miller J. T.
Thermochimica Acta 312, **1998** 17-25.