

Influência da Incorporação de Gálio na Estrutura de Peneiras Moleculares Mesoporosas do Tipo MCM-41

Rebeca A. Silva (PG)*, Patricia R. S. Braga (PG), Elon F. de Freitas (IC), Júlio L. de Macedo (PQ), Sílvia C. L. Dias* (PQ), José A. Dias (PQ).

Laboratório de Catálise, Instituto de Química, Universidade de Brasília, caixa postal 4478, Brasília-DF, 70904-970, E-mail scdias@unb.br e rebeaalmeidas@gmail.com.

Palavras Chave: peneiras moleculares, caracterização, MAS-RMN de ^{29}Si .

Introdução

A família das peneiras moleculares M41S apresenta elevada estabilidade térmica, altas áreas superficiais, ordenamento de longo alcance e tamanho uniforme de poros¹. Seu principal membro é a MCM-41, que possui um arranjo hexagonal de mesoporos e elevada capacidade de adsorção¹. No entanto, este material apresenta baixa acidez, o que é uma desvantagem do ponto de vista da catálise. Uma maneira eficiente de gerar acidez na MCM-41 é a substituição isomórfica de átomos de silício da rede por cátions trivalentes como: boro, alumínio, gálio e ferro². O objetivo deste trabalho foi observar a influência da incorporação de gálio nas características da MCM-41.

Resultados e Discussão

A MCM-41 e a Ga-MCM-41 foram sintetizadas pelo método da coprecipitação à temperatura ambiente³. A fonte de gálio utilizada para obtenção da Ga-MCM-41 foi o nitrato de gálio, com razões Si/Ga iguais a 25 e 50. Para remoção do direcionador, as amostras foram calcinadas em etapas (300°C/3h/ar e 550°C/3h/ar) e os materiais foram caracterizados por DRX, FTIR e MAS-RMN de ^{29}Si .

A Figura 1 mostra os difratogramas de raios X das amostras calcinadas, com as reflexões características indicando que o arranjo hexagonal foi mantido mesmo após a incorporação do gálio.

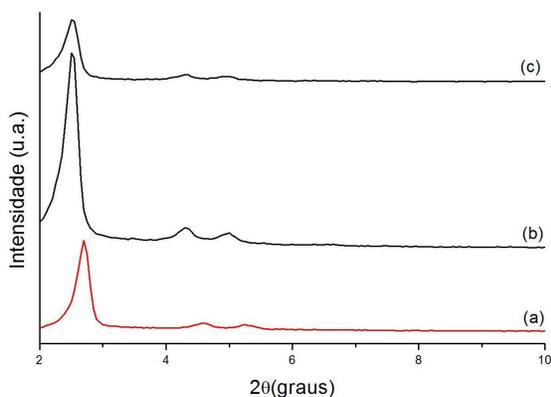


Figura 1. DRX dos materiais calcinados: (a) MCM-41; (b) Ga-MCM-41-50; (c) Ga-MCM-41-25.

Os espectros de FTIR apresentaram bandas características de vibrações da rede da MCM-41.

33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

A análise por MAS-RMN de ^{29}Si demonstrou aumento do grau de condensação e da porcentagem molar de grupos silanóis nos materiais contendo gálio em comparação à MCM-41, devido ao aumento na quantidade de sítios Q^3 e diminuição na quantidade de sítios Q^4 , demonstrado na Tabela 1. As amostras contendo gálio apresentaram uma linha de ressonância em torno de -105 ppm, correspondente a ambientes em que o átomo de silício liga-se a 4 átomos de oxigênio, que por sua vez ligam-se a 3 átomos de silício e 1 de gálio, comprovando a inserção de gálio na rede⁴, com conseqüente aumento na acidez das peneiras moleculares modificadas.

Tabela 1. Resultados da deconvolução dos espectros de MAS-RMN de ^{29}Si .

Amostras*	Q^2	Q^3	Q^4	Grau de Condensação ³	% molar de Si-OH ³
MCM-41	---	4,41	9,40	0,47	31,93
Ga-MCM-41-50	---	6,50	9,08	0,72	41,71
Ga-MCM-41-25	---	8,49	3,86	2,20	68,76

* Materiais calcinados.

Conclusões

As peneiras moleculares MCM-41 e Ga-MCM-41 foram bem sintetizadas, conforme observado por DRX e FTIR. Estudos realizados por MAS-RMN de ^{29}Si evidenciaram a incorporação de gálio na estrutura de ambos os materiais.

Agradecimentos

CNPq, Capes, FINATEC, FINEP/CTPetro, IQ-UnB (FUNPE) e PETROBRAS.

¹ Corma, A. *Chem. Rev.* **1997**, 97, 2373.

² Palomino, G. T.; Pascual, J. J. C.; Delgado, M. R.; Parra, J. B. e Areán, C. O. *Mat. Chem. Phys.* **2004**, 85, 145.

³ Souza, M.P.; Dissertação de Mestrado, Universidade de Brasília, Brasil, **2005**.

⁴ Cheng, C.; He, H.; Zhou, W.; Klinowski, J.; Gonçalves, J. A. S e Gladden, L. F. *J. Phys. Chem.* **1996**, 100, 390.