

ESTUDO DA INTERAÇÃO TIOFENO-ADSORVENTE EM COMBUSTÍVEIS ATRAVÉS DE MODELAGEM MOLECULAR

Alysson Rodrigues Lima¹, Celmy Maria Bezerra de Menezes Barbosa², Ricardo Luiz Longo³

Bolsista Doutorado II - PRH-ANP 28, alyssonrl@hotmail.com, ¹Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Pernambuco, ²Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Pernambuco, ³Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco

RESUMO

MOTIVAÇÃO: Entender o processo de adsorção em escala molecular e eletrônica permite não só a racionalização dos resultados experimentais, mas, principalmente, a proposição de modificações de adsorventes e/ou de novos adsorventes mais eficientes para a remoção de compostos sulfurados em combustíveis líquidos.

OBJETIVO: Estudar modelagem e simulação computacional do sistema de adsorção em complexos tiofeno-NaY. Também serão estudadas as interações com os adsorventes NiO/NaY e ZnO/NaY.

APLICAÇÃO NA INDÚSTRIA DO PETRÓLEO: No refino de petróleo o principal processo de remoção de enxofre é o da hidrodessulfurização, que envolve o uso de catalisadores sofisticados e altas pressões de hidrogênio o que torna o processo mais caro. Processos de adsorção vem sendo estudados para complementar o existente atualmente nas refinarias. Através de métodos de simulação computacional, pode-se obter resultados que ajudem a encontrar catalisadores/adsorventes mais eficientes, reduzindo custos e melhorando a eficiência do processo.

RESULTADOS OBTIDOS: O método ONIOM utilizado para a obtenção da energias de adsorção para o complexo tiofeno-NaY está implementado no programa Gaussian 03. Com parte inicial dos resultados da energia de adsorção do tiofeno com o adsorvente NaY, que é obtida pela diferença entre a energia do complexo NaY-tiofeno e a soma das energias do tiofeno e da zeólita NaY isoladas, foram encontrados os resultados apresentados nas Tabelas 1 e 2, apresentando dois modelos Z40-1T e Z40-3T, em que Z40 refere-se ao maior sistema estudado (40 Å do centro geométrico), e 1T e 3T correspondem ao número de tetraedros, um (AlO₄) e três (O₃SiAlO₄SiO₃). Os resultados apresentados mostraram que o modo de coordenação η^5 é o mais favorável na adsorção de tiofeno na zeólita NaY por apresentar a maior interação entre os elétrons π com a carga do sódio.

Tabela 1: Energias totais (em E_h) e energias de adsorção (E_{ads}) do tiofeno em modo de coordenação η^5 em modelos de zeólita NaY.

Modelo	E _(zeo-tiofeno)	E _(zeo)	E _(tiofeno)	E _{ads} (kcal/mol)
Z40-3T	-2292,501487	-1739,808564	-552,6699105	-14,44
Z40-1T	-1260,292291	-707,6030807	-552,6689371	-12,72

Tabela 2: Energias totais (em E_h) e energias de adsorção (E_{ads}) para o tiofeno em modo de coordenação η^1S em modelos de zeólita NaY.

Modelo	$E_{(zeo-tiofeno)}$	$E_{(zeo)}$	$E_{(tiofeno)}$	E_{ads} (kcal/mol)
Z40-3T	-2292,512638	-1739,822128	-552,6698851	-12,94
Z40-1T	-1260,268203	-707,5910543	-552,6702500	-4,33

Na próxima etapa serão realizados estudos da simulação das energias de adsorção do tiofeno com adsorventes NiO/NaY e ZnO/NaY, para posterior comparação com os resultados iniciais da energia de adsorção e então selecionar o melhor adsorvente para testes experimentais.