

Título em Português:	ADSORÇÃO DE METANO SOBRE NANOCLUSTERS DE ÓXIDO DE ZIRCÔNIA
Título em Inglês:	methane adsorption on zirconia oxide nanoclusters
Área de Pesquisa:	Físico-Química
Palavras Chave:	óxido de zircônia - DFT - metano
Ag. Financiadora do Projeto:	FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo
Projeto:	Iniciação Científica
Unidade de Apresentação:	Instituto de Química de São Carlos
Departamento:	
Validado em:	30/09/2020

Autor:

Nome: Isabelle Leao Gomes **Unidade:**

Instituição: Universidade de São Paulo

Orientador:

Nome: Juarez Lopes Ferreira da Silva Instituição: Universidade de São Paulo
Unidade: Instituto de Química de São Carlos

Colaborador:

Nome: Karla Furtado Andriani Instituição: Instituto de Química de São Carlos

Resumo do Trabalho em português:



ADSORÇÃO DE METANO SOBRE NANOCUSTERS DE ÓXIDO DE ZIRCÔNIA

Isabelle Leão Gomes, Karla F. Andriani, Juarez L. F. Da Silva

Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, P.O. Box
780, 13560 970, São Carlos, SP, Brasil

paraabelle@usp.br

Objetivos

Este trabalho tem como objetivo avaliar a adsorção de metano (CH_4) sobre nanoclusters de óxido de zircônio (ZrO_2)₁₀, através de uma abordagem teórica empregando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), para posterior conversão do CH_4 em outros compostos de maior valor agregado, visto que o gás natural (maior fonte energética industrial) possui 90% de CH_4 .

Métodos e Procedimentos

Para os cálculos, foi empregado a DFT utilizando o funcional de troca-correlação PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) com correção de van-der-Waals, e um conjunto funções de base do tipo *light-tier2*, como implementado no programa FHI-aims (Fritz Harber Intitute – *ab initio molecular simulations*). Primeiramente foi realizado um estudo dos átomos livres envolvidos no processo de adsorção do CH_4 (C, H, O, Zr). Em seguida, foram investigadas as moléculas mais comuns na reação do metano em metanol: CH_3OH , CH_n , H_2O , H_2 , O_2 , CO , CO_2 . Por fim, obtivemos os sistemas $\text{CH}_4/(\text{ZrO}_2)_{10}$ onde as propriedades estruturais, energéticas, eletrônicas, como a energia de adsorção, comprimento e ângulo de ligações, entre outras foram avaliadas.

Resultados

Para a molécula de CH_4 , foram avaliados: o ângulo e comprimento da ligação, frequência vibracional (obtidas experimentalmente através do espectro infravermelho) e a energia de ligação, de forma que, todos os dados obtidos são comparáveis aos encontrados na literatura. Para o cluster $(\text{ZrO}_2)_{10}$, foram selecionadas 20 estruturas encontradas no artigo¹, e por meio de uma técnica de clusterização (baseada em K-means), essas foram reduzidas a 10

estruturas representativas. O CH_4 interage com o cluster principalmente através do átomo de H com o átomo O (Figura 1), com essa interação variando entre -0,89 eV e -0,65 eV, além de provocar um aumento do ângulo médio da ligação HCH, de 109,44° a 111,99° e no comprimento de ligação C-H, que variou de 1,096 Å para 1,102 Å. De forma que, essas modificações sugerem a ativação da molécula de metano pelo cluster de zircônia.

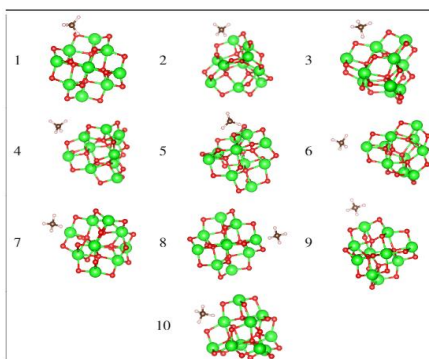


Figura 1: Estruturas otimizadas do sistema $\text{CH}_4/(\text{ZrO}_2)_{10}$.

Conclusões

Diante dos resultados obtidos, é possível observar que a adsorção do CH_4 em $(\text{ZrO}_2)_{10}$ é muito maior que em nanopartículas de metais de transição, como mostra o artigo². Este trabalho está em progresso, e em breve o estudo da de-hidrogenação será iniciado.

Referências

- [1] Zibordi-Besse, L.; *et al.* Phys. Chem. C. 2018, 122, 27702.
- [2] Andriani, K. F.; *et al.* Fuel 2020, 275, 117790.