Química

Adsorção de contaminantes orgânicos de soluções aquosas por modelos de óxido de grafeno (GO)

Stephano Daniel Santos - 7º módulo de Química, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA.

Cleber Paulo Andrada Anconi - Orientador, DQI, UFLA. - Orientador(a)

Larissa Cristina Aparecida Souza - Mestranda em Agroquímica, bolsista CAPES.

Resumo

O crescimento dos processos industriais tem trazido um grande acumulo de substâncias químicas altamente poluentes nos rios, lagos e oceanos. Processos industriais presentes em setores que vão desde o agrícola até indústrias têxteis, farmacêuticas e alimentícias. Nesse sentido, é necessário o desenvolvimento de compostos e métodos capazes de atuar no tratamento de efluentes contaminados. Métodos como, a fotocatálise, a eletrólise e a adsorção vêm sendo analisadas como possíveis técnicas para o tratamento de fluidos contaminados, porém a adsorção tem se mostrado extremamente eficiente, com baixo custo e de fácil aplicação. A adsorção é um processo onde avalia-se a concentração de sólidos (adsorvatos) na superfície de substâncias (adsorventes), presentes em fluidos líquidos e gasosos, capazes de promover a separação entre os sólidos e o fluido. O óxido de grafeno (GO) tem se mostrado como um bom adsorvente pela sua área de superfície e pela presença de grupos oxigenados que são capazes de promover interações entre o GO e outros compostos. Este projeto tem como objetivo o estudo teórico da adsorção dos contaminantes 2-naftol, 1,2,4-triclorobenzeno (TCB) e o 2,4,6-triclorofenol (TCP) em modelos de óxido de grafeno. O estudo foi realizado no Laboratório de Química Fundamental (LQF) do Departamento de Química da Universidade Federal de Lavras. As folhas de GO foram construídas por meio do software GO-MODEL, que inclui aleatoriamente grupos oxigenados, epóxidos e hidroxilas, a uma estrutura de grafeno. Para uma análise preliminar, foram consideradas duas porcentagens de recobrimento: 47,3% e 53,9%. Para o recobrimento de 47,3% foi utilizada uma porcentagem de hidroxilas de 80%, enquanto para o recobrimento de 53,9%, uma porcentagem de hidroxila de 52%. Para as otimizações foi utilizado o método semi-empírico GNF-xTB, onde os sistemas foram avaliados com água como solvente. Foram realizadas 372 otimizações, variando os parâmetros distância (8, 10, 12, 14 e 16 angstroms), ângulo polar (0 e 180º), Alpha(ângulo alpha Euler: 0, 120 e 240º), Beta (ângulo beta Euler: 0 e 180º). Os resultados preliminares encontrados demonstram que a adsorção foi favorável para as duas estruturas de GO, porém ainda são necessários ajustes no procedimento. Espera-se ainda realizar otimizações com outras estruturas de GO, além de comparar os dados obtidos com dados experimentais encontrados na literatura, visando a produção de um artigo científico.

Palavras-Chave: Óxido de Grafeno, Adsorção, GNF-xTB.
Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: https://youtu.be/fdxa_t5tLG8