

Título: ESTUDO DA QUIMISSORÇÃO DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS NO ANATÁSIO

Autores: Gleice S. Santos, Cleidy M. Almeida e Jaime S. Boaventura

Instituições .: Instituto de Química, Universidade Federal da Bahia

Os catalisadores heterogêneos ácido-base são amplamente empregados nos mais diversos processos da indústria química e petroquímica.¹ Nestes processos catalíticos, a primeira etapa reativa é a quimissorção dissociativa dos reagentes, formando ácidos e bases conjugadas adsorvidas nos sítios bases e ácidos, respectivamente. O anatásio tem apresentado grande potencial como catalisador de reações foto-assistidas e como suporte para sistemas exibindo forte interação metal-suporte (SMSI), entre os quais a desidratação e desidrogenação de álcoois. Além disto, o anatásio tem-se mostrado uma superfície modelo ideal pois, devido a sua relativa inatividade a temperatura ambiente, a adsorção de espécies orgânicas no anatásio pode ser observada sem outras reações além de transferência de prótons. Esse trabalho apresenta o estudo da quimissorção de vários ácidos de Bronsted na superfície limpa do anatásio. Uma pastilha de anatásio, inicialmente limpa e oxidada, foi exposta ao reagente gasoso; após evacuação do gás, um espectro de infravermelho da amostra era coletado. O perfil de quimissorção do ácido de Bronsted pode ser determinado a partir de mudanças do espectro de infravermelho após exposições sucessivas da pastilha de anatásio ao reagente. O perfil da quimissorção do metanol-d₄ no anatásio foi estudada em detalhes para o melhor entendimento do processo da quimissorção dissociativa. Na presença de metanol-d₄ gasoso, foram identificadas duas espécies na superfície do anatásio: uma espécie molecularmente adsorvida e outra dissociativamente e irreversivelmente adsorvida. A concentração superficial da espécie molecularmente adsorvida dependia apenas da pressão parcial do metanol-d₄ e provavelmente era um precursor à quimissorção. Para a espécie irreversivelmente adsorvida, os dados experimentais da quimissorção do metanol-d₄ no anatásio foram ajustados por meio das equações baseadas nos formalismos de Langmuir, Elovich e Temkin. Inicialmente, um mecanismo de uma etapa foi utilizado. Com esse mecanismo, perfis desenvolvidos a partir dos formalismos de Temkin e Elovich ajustaram bem os dados experimentais até uma concentração superficial relativa de 0,7. O perfil de Langmuir não foi adequado para representar os dados experimentais. Um segundo mecanismo baseado em duas etapas de adsorção foi utilizado para ajustar os dados experimentais a altas concentrações superficiais. O perfil baseado no formalismo de Temkin ajustou adequadamente todo o perfil experimental. O formalismo de Elovich, como esperado, falhou para altas concentrações superficiais e o formalismo de Langmuir mostrou-se novamente inadequado para representar os dados. Os perfis de quimissorção no anatásio foram experimentalmente determinados para vários ácidos de Bronsted, incluindo etanol, dimetilbutanol, pentafluoropentanol, fenol e ácido fórmico. Esses perfis experimentais foram ajustados por meio do formalismo de Temkin.

¹B. C. Gates, *Catalytic Chemistry*, Wiley, New York, 1991