

Título: ESTUDO DAS REAÇÕES DE TRANSFERÊNCIA DE HIDRETO EM ZEÓLITAS

Autores: Leandro A. Noronha e Claudio J. A. Mota

Instituições .: Instituto de Química, Dept. Química Orgânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro
Cidade Universitária, CT Bloco A, Rio de Janeiro 21949-900, Brasil

As reações de transferência de hidreto (fig. 1) são bastante importantes em processos da indústria do petróleo. São elas que propagam o craqueamento catalítico e estão envolvidas nas reações de formação de coque. Elas são igualmente importantes em processos de alquilação de hidrocarbonetos para produção de gasolina de alta octanagem. Porém, existem poucos estudos acerca de como esta reação se passa na superfície da zeólita. Desta forma, um melhor conhecimento delas é extremamente importante para se desenvolver melhores catalisadores de craqueamento e alquilação de hidrocarbonetos.

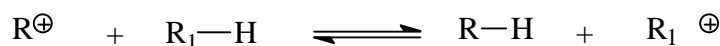


Fig. 1: Esquema reacional de uma reação de transferência de hidreto.

Apesar de ser uma reação bastante importante do ponto de vista da indústria do petróleo, existem poucos estudos acerca do mecanismo de transferência de hidreto em zeólitas. A proposta deste trabalho é realizar um estudo teórico da reação de transferência de hidreto utilizando um agregado mais representativo da estrutura da zeólita. Os cálculos teóricos foram realizados sobre um agregado T6 (figura 2), representando uma parte real da estrutura da zeólita Y, utilizada como catalisador de craqueamento catalítico. A geometria foi otimizada a nível de funcional da densidade (B3LYP), utilizando-se bases do tipo cep-31G**. Inicialmente, calculou-se a geometria e energia dos alcóxidos adsorvidos (metila, etila, isopropila e t-butila). Estes cálculos foram feitos para um agregado contendo 1 e 2 átomos de alumínio variando suas posições. Com os dados de energia destes sistemas e calculando-se a energia de alcanos (metano, etano, propano e isobutano) ao mesmo nível de teoria, foi possível obter-se informações sobre a termoquímica das reações de transferência de hidreto em zeólitas.

Alcóxidos no T6	Alcanos		Alcóxidos no T6	Alcanos	?E (Kcal/mol)
Metoxi-T6	Etano	→	Etoxi(a)-T6	Metano	-4.6
Metoxi-T6	Etano	→	Etoxi(b)-T6	Metano	-4.6
Metoxi-T6	Propano	→	i-Propoxi-T6	Metano	-9.7
Metoxi-T6	Isobutano	→	t-Butoxi-T6	Metano	-6.4
Etoxi(b)-T6	Propano	→	i-Propoxi-T6	Etano	-1.8
Etoxi(b)-T6	Isobutano	→	t-Butoxi-T6	Etano	+1.5
i-Propoxi-T6	Isobutano	→	t-Butoxi-T6	Propano	+3.3

De acordo com a tabela acima as reações de Metoxi-T6 com os alcanos foram todas exotérmicas. Para a reação com isobutano, de forma a obter-se o alcóxido terciário, os cálculos mostraram uma reação endotérmica. Isto sugere que o t-butoxi-T6 apresenta grandes problemas estéricos.

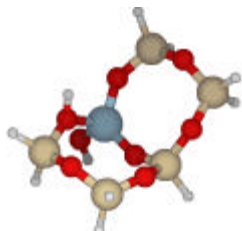


Fig. 2: Agregado T6 utilizado em cálculos teóricos sobre transferência de hidreto em zeólitas.