

ESTUDO DA ADSORÇÃO DE DIMETILMERCÚRIO UTILIZANDO ZEÓLITA

Luis Guilherme Laino da Silva Pereira

Aluno de Graduação de Engenharia Química - 5º período, UFRJ

lpereira@cetem.gov.br

Julio Cesar Guedes Correia

Orientador, Químico Industrial, D.Sc.

jguedes@cetem.gov.br

Alexandre Nelson Martiniano Carauta

Co-orientador, Químico, D.Sc., FTESM

ancarauta@uol.com.br

1. INTRODUÇÃO

O dimetilmercúrio é a forma de composto molecular mais tóxico do mercúrio e o interesse em seu estudo deve-se principalmente a sua capacidade de ser bioacumulado por intermédio de adsorção em corpos superficiais, na ingestão de alimentos, principalmente de peixes (BISINOTI & JARDIM, 2004). As zeólitas são compostos formados por tetraedros de SiO_4 e AlO_4 conectados pelos átomos de oxigênio nos vértices. A estrutura das zeólitas apresenta canais e cavidades, onde se encontram os cátions de compensação, moléculas de água ou outros adsorvatos. Sua estrutura microporosa permite a mobilidade de íons pelos canais e cavidades. O processo de troca iônica está diretamente relacionado à substituição dos cátions intersticiais por cátions da solução, e este processo depende de vários fatores, que propiciam seletividade (JIMENEZ *et al.*, 2004). Neste trabalho, será estudada a natureza das espécies catiônicas e característica estrutural da zeólita em questão.

2. OBJETIVOS

Estudar a interação entre o dimetilmercúrio e a zeólita chamada stilbita (STI), tentando prever a ação dessa zeólita para descontaminação de efluentes.

3. METODOLOGIA

A estrutura da zeólita STI foi obtida no banco de dados do programa Material Studio, da empresa Accelrys, enquanto que a molécula do metilmercúrio foi construída no mesmo programa. A construção da molécula de metilmercúrio foi realizada manualmente no programa de visualização gráfica do *software*. Finalizada a construção, a molécula foi submetida a uma rápida otimização de geometria, usando métodos de mecânica molecular, com a utilização do campo de força DREIDING incluso no programa FORCITE. Posteriormente, foi realizado um cálculo com teoria do funcional de densidade (DFT), com o programa GAUSSIAN 03 W, para garantir que a estrutura calculada pelo método de mecânica molecular resultou em uma estrutura de energia mínima (Figura 1). A partir da estrutura da zeólita obtida do banco de dados, foi realizado um cálculo das cargas atômicas utilizando o método Qeq para equilíbrio das cargas (Rappé and Goddard, 1991) com algoritmo Ewald para tratar as interações de não ligadas (eletrostáticas, ligações de hidrogênio e forças de van der Waals) (Figura 2).

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados de cálculos DFT para o dimetil-mercúrio mostram que essencialmente as duas estruturas conformacionais esperadas (eclipsada e estrelada) têm essencialmente as mesmas energias, pelo menos no nível de cálculo utilizado.

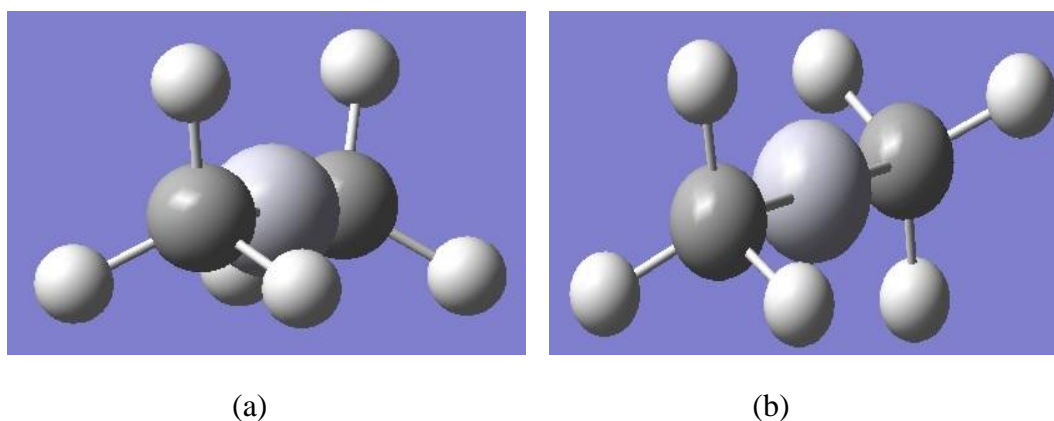


Figura 1. (a) estrutura eclipsada – $E = -75649,08$ kcal/mol. (b) estrutura estrelada – $E = -75649,08$ kcal/mol

As cargas atômicas calculadas pelo método descrito acima são mostradas na Figura 2.

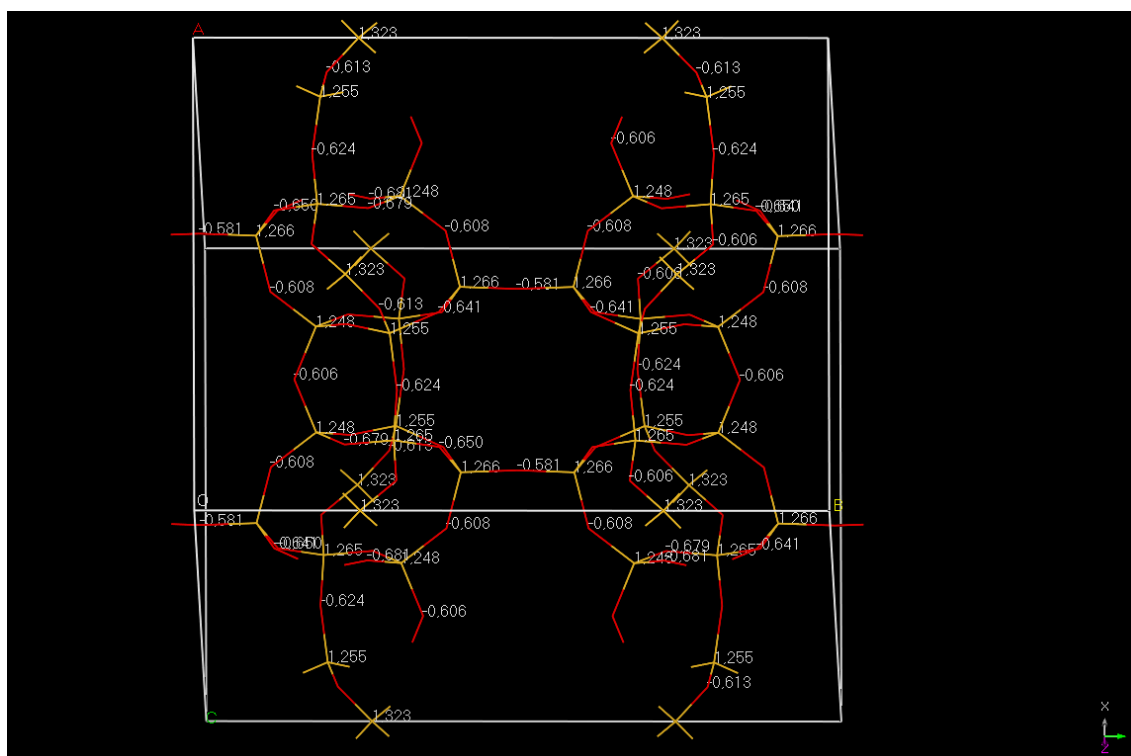


Figura 2. Cargas atômicas calculadas para a zeólita STI.

Cálculos de mecânica e dinâmica molecular da interação da zeólita STI e do dimetilmercúrio (Figura 3) estão em andamento.

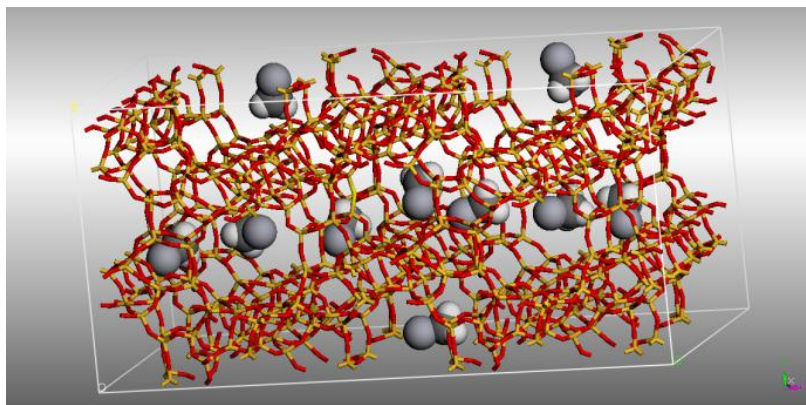


Figura 3. Interação da zeólita chamada de STI e 10 moléculas de metilmercúrio.

5. CONCLUSÕES

Os ensaios preliminares realizados, por meio de modelagem molecular, com o sistema zeólita (STI) – dimetil-mercúrio apresentaram resultados alvissareiros o que nos leva a continuar estudando esse sistema com mais interesse, inclusive utilizando outros tipos de zeólitas e realizando estudos em laboratório com os melhores resultados com o intuito de se obter a validação dos resultados de modelagem molecular.

6. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CETEM pela infraestrutura oferecida, a CATE e ao CNPQ pela bolsa de Iniciação Científica e a Prof. Dra. Elaine Maia, do Departamento de Química, da Universidade de Brasília (UnB) pela disponibilidade do programa de modelagem molecular Materials Studio.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGUIAR, M. R. M. P.; NOVAES, A. C.; GUARINO, A. W. S. **Remoção de metais pesados de efluentes industriais por aluminossilicatos.** Química Nova, Vol. 25(6B), 1145-1154, 2002.
- BISINOTI, M. C.; JARDIM, W. F. **O Comportamento do Metilmercúrio (MetilHg) no Ambiente.** Química Nova, Vol. 27, No. 4, 593-600, 2004.
- BRECK, D. W. **Zeolite Molecular Sieves,** Wiley: New York, 1974.
- COLELLA, C.; MISAELIDES, P.; MACÁSEK, F.; PINNAVAIA, T. J. **Natural Microporous Materials in Environmental Technology.** Kluwer Academic Pub.: London, p. 207, 1999.
- DANA, J. D.; HURLBUT Jr., C. S. **Manual de Mineralogia, Ao Livro Técnico S.A.:** Rio de Janeiro, 1970.
- GASPARD, M.; NEVEU, A.; MARTIN, G. **Water Res.** 17, 279, 1983.
- HARBEN, P. W.; KUZVART, M. **Industrial Minerals – a Global Geology.** London, Industrial Minerals Information Ltd, 462, 1996.
- INGLEZAKIS, V. J.; LOIZIDOU, M. D.; GRIGOROPOULOU, H. P. **Water Res.** 36, 2784, 2002.

JENNE, E. A.; **Adsorption models**. In: JENNE, E. A. (ed.). Adsorption of metals by geomeia: variables, mechanism and model applications. San Diego, Academic Press, 11-36, 1998.

JIMENEZ, R. S.; BOSCO, S. M. D.; CARVALHO, W. A. **Remoção de metais pesados de efluentes aquosos pela zeólita natural escolécita - influência da temperatura e do pH na adsorção em sistemas monoelementares**. Química Nova, Vol. 27, No. 5, 2004.

LACERDA, L. D.; BIDONE, E. D.; GUIMARÃES, A. F.; PFEIFFER, W. C.; **An. Acad. Bras. Cienc.** 66, 373, 1994.

PETRUS, R.; WARCHOL, J. **Microporous Mesoporous Mater.** 61, 137, 2003.

ROSENBAACH, N.; KLING, D. P.; MOTA, M. B. S.; MOTA, C. J. A. **Dinâmica molecular ab initio de carbocátions adsorvidos em zeólitas**. 34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química.

SHERMAN, J. D. **Zeolites: Science and Technology**. NATO Advanced Study Institute Series, Applied Sciences, Ser. E, N^o. 80, Ribeiro, F. R, ed.; Martinus Nijhoff Publishers: Boston, p. 583, 1984.