

Dimerização de Propano em Zeólitas Contendo Gálio

Felipe M. Fernandes¹ (IC), Márcio S. Pereira^{1,*} (PQ), Marco A. C. Nascimento² (PQ)

¹DEQUIM/UFRRJ; ²IQ/UFRRJ;
*msoares@ufrj.br

Palavras Chave: Zeólita, Propano, Dimerização

INTRODUÇÃO

A reforma catalítica das naftas para produzir hidrocarbonetos aromáticos é um processo industrial amplamente utilizado.¹ Enquanto esta tecnologia está baseada na conversão do carbono C6+ parafínico em aromático, o uso de gás liquefeito de petróleo de baixo custo na deshidrociclodimerização com uso de zeólitas (em particular as zeólitas que contêm Gálio), gera uma nova forma de produção destes hidrocarbonetos.

A introdução de espécies metálicas como Pt, Zn, Ga, etc., em zeólita H-MFI aumenta a atividade e a seletividade da aromatização das reações.² O uso de gálio parece ser preferencial às aplicações industriais devido à alta estabilidade do Gálio substituído na zeólita sobre certas condições de operação.³

Pela sua grande importância comercial, o sistema gálio/H-MFI tem sido amplamente estudado. Entretanto, muitos aspectos do mecanismo de reação ainda não foram determinados.

MÉTODOS

A zeólita foi modelada pelo aglomerado T5 (com 5 átomos tetraédricos) e também pelo aglomerado T22 (com 22 átomos tetraédricos) que consegue reproduzir melhor os efeitos de cavidade. Todos os cálculos foram realizados através do programa Jaguar com o funcional de densidade B3LYP e base LACVP.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para o T5 temos o resultado das energias de otimização de reagentes e produtos já incluindo a energia de ponto zero (vide tabela). Foi feito o cálculo de frequência a fim de confirmar que as estruturas eram mínimos na superfície de energia potencial.

Reagentes	Energia Relativa (Kcal/mol)**
T5 – Propano (C1)*	0,4
T5 – Propano (C2)	0

Produtos	Energia Relativa (Kcal/mol)
T5 – Hexano (C1)*	-14,6
T5 – 2,3-Dimetil-Butano (C1)*	-13,2
T5 – 2-Metil-Pentano (C1)*	-12,5
T5 – isoMetil-Pentano (C2)	-17,7

*C1 representa o hidrocarboneto ligado à zeólita através do carbono primário e C2 o hidrocarboneto ligado à zeólita através do carbono secundário.

** Energia relativa ao do T5 – Propano (C2), incluindo a energia de ponto zero.

É possível observar que todos os produtos são mais estáveis do que os reagentes e que dentre os produtos, o mais estável é o T5 substituído com o iso-metilpentano.

CONCLUSÕES

Foi estudada a reação de dimerização de propano em zeólitas contendo Gálio. Foram obtidos 4 possíveis produtos sendo o mais estável o T5 iso-metilpentano. Estão sendo finalizados os cálculos com o aglomerado T22, incorporando o efeito da cavidade.

AGRADECIMENTOS: FAPERJ, CNPq, INOMAT

- (1) Seddon, D. Catal. Today 1990, 6, 351.
- (2) Brabec, L.; Jeschke, M.; Meusinger, J. Appl. Catal., A 1998, 167, 309.
- (3) Mowry, J. R.; Anderson, R. F.; Johnson, J. A. Oil Gas J. 1985, 83, 128.