

Maghemita dopada com cobre (Cu- γ -Fe₂O₃) para aplicação em reações Fenton heterogêneo: estudo experimental e teórico

Teodorico C. Ramalho* (PQ), Maíra S. Pires (PG), Lívia C. T. Lacerda (PG), Telles C. Silva (PG), Silviana Corrêa (PG), Francisco G. E. Nogueira (PG), Juliana A. Torres (PG), Eduardo P. Rocha (PG), Mateus A. Gonçalves (PG).

Grupo de Química Computacional. Departamento de Química. Universidade Federal de Lavras, Campus Universitário. CEP 37200-000, Lavras-MG, Brasil

*teo@dqi.ufla.br

Palavras-chave: Maghemita, catálise, DFT

INTRODUÇÃO

Maghemita (γ -Fe₂O₃) é um mineral de forte caráter magnético, que apresenta uma estrutura espinélio inverso. Este material é utilizado em várias áreas, incluindo a catálise.¹ É bem conhecido que suas propriedades físicas e químicas podem ser ajustadas mediante alteração dos íons metálicos inseridos na rede cristalina.² Tendo em vista o efeito do dopante e a importância desse mineral para catálise, o objetivo deste trabalho é o estudo das propriedades estruturais e eletrônicas da maghemita dopada com Cu (Cu- γ -Fe₂O₃). Além disso, pretende-se propor um mecanismo para degradação de H₂O₂ e geração dos radicais hidroxilas em reações Fenton heterogêneo. Para isto, foram aplicadas técnicas experimentais, além de cálculos computacionais em condições periódicas utilizando o método DFT.

MÉTODOS

O material FeCu300 foi preparado pelo método dos precursores poliméricos a 300 °C e caracterizado por raios X.³ Os cálculos teóricos foram realizados em condições periódicas com o método DFT utilizando o funcional OPBE e função de base TZP no programa BAND-ADF. As superfícies da maghemita pura e dopada foram otimizadas no intuito de analisar a influência da substituição isomórfica do Cu na barreira de ativação. Os cálculos foram feitos com uma camada de átomos. Os intermediários e estados de transição foram caracterizados por cálculos de frequência vibracional.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Por DRX, a predominância da fase (Cu- γ -Fe₂O₃) foi observada por meio da caracterização pelo plano de índice (311). O parâmetro de rede $a = 8,33$

também confirma a presença da fase maghemita. Na Figura 1 está apresentado o mecanismo de

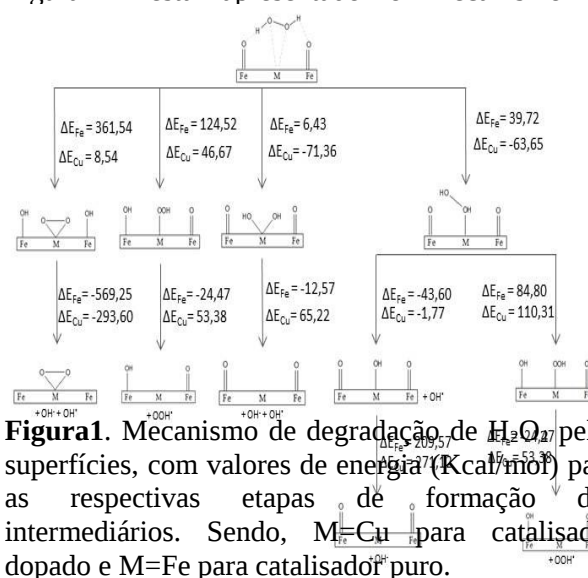


Figura 1. Mecanismo de degradação de H₂O₂ pelas superfícies, com valores de energia (Kcal/mol) para as respectivas etapas de formação dos intermediários. Sendo, M=Cu para catalisador dopado e M=Fe para catalisador puro.

CONCLUSÃO

A Cu- γ -Fe₂O₃ foi sintetizada com sucesso, permitindo análise satisfatória de DRX. Os valores de energia obtidos por DFT apontam que a superfície modificada é mais promissora para aplicação em reações Fenton heterogêneo se comparada à superfície pura.

AGRADECIMENTOS

FAPEMIG, CNPq e CAPES.

- ¹Goulart, A.T.; et al. Phys. Chem. Miner. 1996, 25, 63.
- ²Romero, E.; Soto, R.; Durán, P.; Herguido, J.; Penã, J.A. Int. J. Hydrogen Energy. 2012, 37, 6978.
- ³Tu, H.; et al. J. Power Sources. 2011. 196, 3109.