Química

Remoção de poluentes em água com emprego de nanoflakes de grafeno: uma abordagem teórica

Stephano Daniel Santos - 6º módulo de Química, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA

Cleber Paulo Andrada Anconi - Orientador DQI, UFLA - Orientador(a)

Resumo

O grafeno consiste de uma única e fina camada de grafite, fina o suficiente para ser considerada bidimensional, possuindo um átomo de espessura. Possui uma estrutura hexagonal, onde cada átomo de carbono, com hibridização sp2, está ligado a outros três átomos de carbono adquirindo a aparência de uma colmeia. O grafeno começou a ser estudado teoricamente no final da década de 1940, entretanto, durante anos foi considerado termodinamicamente instável levando a crer que o grafeno não existira em sua forma isolada. Entretanto na década de 2000 dois pesquisadores da Universidade de Manchester, tiveram êxito em produzir, isolar, identificar e caracterizar o grafeno, mediante método de exfoliação mecânica simples para extrair finas camadas do grafite. Os trabalhos publicados renderam aos pesquisadores Andre Geim e Konstantin Novoselov o Prêmio Nobel de Física de 2010. O carbono é muito utilizado como um adsorvente versátil na remoção de vários poluentes em soluções aquosas. O grafeno, sendo um alótropo do carbono, torna-se uma boa alternativa para remoção de poluentes em água. O objetivo deste trabalho foi o estudo teórico da interação dos poluentes acenafteno, acenaftileno, fenantreno e naftaleno com um nanoflake de grafeno, bem como desenvolver habilidades no trato teórico de sistemas intermoleculares e na construção dos modelos moleculares utilizados no Laboratório de Química Fundamental (LQF), do Departamento de Química da Universidade Federal de Lavras. Para a execução de uma investigação preliminar, fez-se o uso da Teoria do Funcional de Densidade (DFT), na qual o nível de teoria empregado foi B97D/6-31G(d,p). Foi avaliado, nesse nível de teoria, a diferença entre a energia eletrônica nuclear das espécies analisadas. As simulações efetuadas, indicaram que a interação entre o nanoflake de grafeno e os poluentes acenafteno, acenaftileno, fenantreno e naftaleno são favoráveis, devido a análise das energias totais de interação obtidas, sendo respectivamente -17,3 kcal/mol, -18,3 kcal/mol, -18,3 kcal/mol e -15,6 kcal/mol. Este processo de interação favorável pode ser explicado pela ocorrência de interação do tipo empilhamento, fenômeno físico que ocorre pela polarização das nuvens eletrônicas em sistemas cíclicos. Espera-se ainda analisar interações de poluentes com modelos de grafeno funcionalizado e futuramente interações também com ciclodextrina e avaliar qual sistema apresentará uma melhor estabilidade.

Palavras-Chave: Nanoflakes de Grafeno, Poluentes, DFT.
Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: https://youtu.be/-N_WcwruDrE