

**Título: Modelagem molecular de carvão ativado: estudo de propriedades de adsorção**

**Autor(es)** Davi do Socorro Barros Brasil; Diana Mônica da Silva Furtado; Frederico Guilherme Santana da Silva Filho

**E-mail para contato:** diana.furtado@estacio.br

**IES:** ESTÁCIO BELÉM

**Palavra(s) Chave(s):** Dinâmica molecular, Adsorção, hidrocarbonetos, Carvão ativado

#### **RESUMO**

Os hidrocarbonetos monocromáticos (HC) que são os constituintes mais solúveis e mais móveis da fração de algumas substâncias, como por exemplo, da gasolina são os maiores responsáveis pela contaminação de solos, rios e mananciais. O método mais usado para a remoção e tais poluentes é a adsorção utilizando o carvão ativado. O carvão ativado é um adsorvente microporoso, obtido de uma enorme gama de materiais carbonáceos, tais como: madeira, hulha, lignina, açúcares, casca de coco dentre outros, pois este apresenta uma habilidade significativa para adsorver componentes orgânicos de baixo peso molecular como o benzeno, tolueno e o p-xileno. Neste trabalho, utilizando um carvão ativado pretendeu-se estudar o fenômeno de adsorção em carvão ativado a partir de soluções de benzeno (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>), tolueno (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>3</sub>) e p-xileno (C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>) por técnicas in silício, ou seja, verificou-se a adsorção dos mesmos sobre o carvão ativado via simulação computacional. Para isso, várias etapas foram concluídas, desde os modelos das estruturas do carvão e dos poluentes até as simulações de dinâmica molecular. Usou-se um modelo de carvão proposto na literatura e submeteu-se o mesmo a cálculos de dinâmica molecular, com método B3LYP/6-31G e campo de força PM3. As cargas do carvão e dos poluentes foram calculadas com o programa Gaussian 09, cujo arquivos de saída foram convertidos para o formato necessário para cálculos com AMBER 12. Também foram criados três complexos, um para cada poluente possibilitando o estudo da adsorção separadamente em cada um e o modelo usado para simular a célula unitária foi representado em bicamada com diâmetro de poro de 20 Angstroms e 10 moléculas de poluente no interior e nas proximidades da célula. Para parametrização destes usou-se os campos de força PM3. Estes modelos foram submetidos a cálculos de aquecimento até 298 K e dinâmica molecular durante 10 ns. Como resultados das análises, verificou-se que o fenômeno de adsorção sobre os hidrocarbonetos o mais efetivo foi sobre p-xileno.