

PAPEL DOS ORBITAIS MOLECULARES DE FRONTEIRA NA REATIVIDADE QUÍMICA DA ZEÓLITA RUB-11: UM ESTUDO DO MÉTODO DFT

ROLE OF FRONTIER MOLECULAR ORBITALS IN THE CHEMICAL REACTIVITY OF RUB-11 ZEOLITE: A DFT STUDY

José de B. M. Neto¹, Aparecida H. M. do Carmo^{1,2}, Rafaela G. Faustino³, Guilherme R. Araújo⁴, Anna B. V. Pavão⁵, David L. Azevedo⁶, Raquel M. T. Fernandes⁷, Alamgir Khan⁸

1,2 - Programa de Pós Graduação em Engenharia Aeroespacial - PPGEA, Universidade Estadual do Maranhão, (UEMA), São Luís, MA, Brasil.

3,5- Graduando(a) de licenciatura de Química, Universidade Estadual do Maranhão, São Luís, Brasil.

6 - Instituto de Física, Universidade de Brasília (UnB), Brasília, DF, Brasil.

7,8 -Departamento de Química, Universidade Estadual do Maranhão, São Luís, Brasil.

britomonteiro712@gmail.com

RESUMO

Pesquisas sobre a utilização de zeólita cresceram devido à diversidade de suas aplicações, especialmente por sua característica seletiva, capacidade de adsorção química e estabilidade térmica [1]. Vem sendo destaque, em razão da sua importância no desenvolvimento científico e tecnológico. Este estudo tem como objetivo caracterizar a estrutura da zeólita RUB-11 visando futura aplicação no setor aeroespacial, com a modelagem molecular utilizando o módulo Dmol3 pelo software Materials Studio 2017 [2], através do método DFT (Density Functional Theory), o qual viabiliza o estudo de sistemas de muitos corpos, uma vez que permite descrever as propriedades eletrônicas e estruturais com precisão satisfatória e custo computacional viável, e a base de onda numérica dupla com funções de polarização (DNP) [3-6]. Após a otimização geométrica das estruturas, distribuídas nos oito anéis, observamos a variação de diâmetros de 3,7 Å a 4,5 Å, com ligações entre Si-O de 1,65 Å e 1,66 Å, e ângulos O-Si-O variando entre 110° e 113°, em concordância com parâmetros existentes da zeólita RUB-11 na literatura [7]. Além desses parâmetros geométricos, foram determinadas as energias de orbitais moleculares de fronteira, como HUMO (Highest Occupied Molecular Orbital) e LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital), respectivamente de -7,451 eV e -1,382 eV, resultando em um gap que indica elevada estabilidade eletrônica. A análise da função de Fukui revelou sítios reativos na RUB-11, relevantes para processos de adsorção ou dopagem com metais de transição. Os resultados indicam o potencial da RUB-11 para aplicações aeroespaciais, como filtragem seletiva, catálise e controle ambiental.

Palavras-chave: Química Computacional, Zeólita, RUB-11, DFT.

ABSTRACT

Research on the use of zeolite has grown due to the diversity of its applications, especially due to its selective characteristics, chemical adsorption capacity and thermal stability [1]. It has been standing out due to its importance in scientific and technological development. This study aims to characterize the structure of the RUB-11 zeolite aiming at future application in the aerospace sector, with molecular modeling using the Dmol3 module by the Materials Studio 2017 software [2], through the DFT (Density Functional Theory) method and the double numerical wave basis with polarization functions (DNP) [3-6]. After geometric optimization of the structures distributed in the eight rings, we observed the diameters ranging from 3.7 Å to 4.5 Å, with Si–O bonds of 1.65 Å and 1.66 Å, and O–Si–O angles ranging from 110° to 113°, in agreement with the existing parameters of the RUB-11 zeolite in the literature [7]. In addition to these geometric parameters, the energies of the frontier molecular orbitals, such as HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) and LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) with energy of -7.451 eV and -1.382 eV were determined, respectively. The band-gap in between the Energies showed high electronic stability of the molecular structure thus indicates a forbidden conduction band. The analysis of the Fukui function indicates the reactive sites in RUB-11, which can help in the doping with the transition metals and the adsorption processes.

Keywords: Computational Chemistry, Zeolite, RUB-11, DFT.

REFERÊNCIAS

- [1] SILVA, Fabiana Medeiros do Nascimento et al. Síntese de membranas zeolíticas (Mordenita/ α -alumina) utilizando os métodos de síntese hidrotérmica, dip-coating e transporte em fase vapor e avaliação na separação emulsão óleo/água. 2017.
- [2] BIOVIA, Dassault Systemes. Materials Studio 2017, Dassault Systemes. 2016.
- [3] KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. **Physical review**, APS, v. 140, n. 4A, p. A1133, 1965.
- [4] HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. **Physical review**, APS, v. 136, n. 3B, p. B864, 1964.
- [5] PERDEW, John P. Generalized gradient approximation made simple. **Phys. Rev. Lett.**, v. 77, p. 3868, 1997.
- [6] VIANA, Giscard Eanes Dias. Estabilidade térmica e propriedades eletrônicas de nanoflakes de nitreto de boro. 2019.
- [7] GROSSKREUZ, Isabel et al. Synthesis and real structure of RUB-11, a novel high-density silica zeolite based on magadiite layers. **New Journal of Chemistry**, v. 48, n. 9, p. 4030-4042, 2024.