

ESTUDO DA REAÇÃO QUÍMICA ENTRE SULFETO DE HIDROGÊNIO E OXIGÊNIO UTILIZANDO DINÂMICA MOLECULAR AB INITIO.

LUCAS DE SOUZA FRANÇA^{1*} (PG), ADEMIR JOÃO CAMARGO² (PQ).

¹Universidade Estadual de Goiás-UnUCET, Anápolis-GO, lucasf8819@gmail.com.

²Universidade Estadual de Goiás-UnUCET, Anápolis-GO

RESUMO

A diminuição das reservas mundiais de combustível fóssil tem como consequência um aumento da utilização de combustíveis com alto teor de substâncias prejudiciais a saúde humana e ao meio ambiente. Dentre estas substâncias se destaca o sulfeto de hidrogênio. A utilização de combustíveis contendo sulfeto de hidrogênio resulta na formação de gases ácidos que afetam a camada de ozônio e produzem chuvas ácidas. A exposição ao sulfeto de hidrogênio em níveis de 100pm ou maiores pode ser fatal para vida humana. Consequentemente é necessário uma forma de tratamento adequada e eficiente para utilização de combustíveis contendo alto teor de sulfeto de hidrogênio. O processo mais utilizado para o tratamento do sulfeto de hidrogênio consiste em uma reação química conhecida como processo de Claus, neste processo o sulfeto de hidrogênio sofre combustão a fim de formar como produtos enxofre e água. O presente trabalho tem como objetivo estudar a reação química que ocorre entre o oxigênio e o sulfeto de hidrogênio, a nível molecular, em temperaturas elevadas, simulando assim a etapa termica do processo de Claus. Para este fim está sendo utilizada a técnica de dinâmica molecular ab initio de car-parrinello.

Palavras-chave: Processo de Claus. Dinâmica molecular ab initio. Car-parrinello. Sulfeto de hidrogênio. Combustão.

Introdução

Devido aos efeitos prejudiciais causados pelo sulfeto de hidrogênio liberado no meio ambiente, a emissão deste gás é estritamente controlado pelos órgãos responsáveis pelo controle da qualidade ambiental. Desta forma o gás natural que contém alto teor de sulfeto de hidrogênio deve passar por um rigoroso processo de tratamento antes que seja disponibilizado para o uso. Para processar o sulfeto de hidrogênio é necessário antes separá-lo do gás natural cru através de métodos utilizando aminas (JOU *et al.*, 1982). O sulfeto de hidrogênio já extraído do gás natural cru é então neutralizado através de reações químicas no processo de Claus (EL-BISHTAWI; HAIMOUR, 2004). O processo de Claus é dividido entre uma etapa

termica, onde a reação entre o sulfeto de hidrogênio e o oxigênio acontece em temperaturas elevadas, e a etapa catalítica onde o restante da mistura de gás, contendo baixa concentração de sulfeto de hidrogênio, reage com auxílio de um catalizador (SELIM, 2012). Com a atual capacidade computacional disponível hoje é possível estudar mecanismo de reação, como os que acontecem entre o sulfeto de hidrogênio e o oxigênio, a nível molecular utilizando técnicas de simulação computacional.

O método de simulação computacional conhecido como dinâmica molecular utiliza a segunda lei de Newton a fim de gerar uma série de pontos correlacionados ao tempo em um espaço de fase, fornecendo uma trajetória para as partículas. A propagação ocorre a partir da coordenada e velocidade inicial de cada partícula executando-se uma série de etapas com tempo finito (JENSEN, 2007). O método desenvolvido em 1985 por Roberto Car e Michelle Parrinello é fruto da junção entre a mecânica clássica e a mecânica quântica. Este método permite o tratamento dos núcleos atômicos e elétrons separadamente através do uso da aproximação de Born-Oppenheimer. O movimento dos núcleos atômicos é abordado utilizando-se a mecânica clássica enquanto o comportamento dos elétrons é descrito através da mecânica quântica (CAR; PARRINELLO, 1985).

Material e Métodos

Para realizar a dinâmica molecular de Car-Parrinello do conjunto sulfeto de hidrogênio-oxigênio estão sendo utilizados os computadores do laboratório do grupo de química teórica e estrutural de Anápolis (QTEA). Os programas utilizados para realizar o trabalho são: Hyperchem, Gaussian e CPMD.

Resultados e Discussão

Até o momento foram realizados 300000 steps (aproximadamente 7256 femtossegundos) de simulação onde se observou a formação de radicais como OH OOH e dióxido de enxofre (SO₂). A simulação continua em andamento, porém houve uma anomalia com a energia cinética nuclear que ainda está sobre investigação.

Considerações Finais

Espera-se com esse trabalho determinar energias de ativação de estados de transição juntamente com constantes de equilíbrio. Os resultados obtidos serão analisados empregando-se outra técnica de simulação conhecida como metadynamics a fim de comparação com alguns resultados experimentais disponíveis na literatura.

Agradecimentos

Agradecimentos: CAPES pelo auxílio financeiro.

Referências

CAR, R.; PARRINELLO, M. Unified Approach for Molecular Dynamics and Density Functional Theory. **Physical Review Letters** 1985. p. 2471–2474

EL-BISHTAWI, R.; HAIMOUR, N. Claus Recycle with Double Combustion Process. In **Fuel Processing Technology**. 2004. 245-260

JOU, F.; MATHER, A. E.; OTTO, F. D. Solubility of H₂S and CO₂ in Aqueous Methyldiethanolamine Solutions. In **Industrial and Engineering Chemistry Process Design**. 1982. 539-544.

JENSEN, F. **Introduction to Computational Chemistry. Second edition**. Wiley, 2007. 583p.

SELIM, H. M. M. E. **Characteristics and Chemical Kinetics of Hydrogen Sulfide Combustion In Thermal Claus Reactor**. College Park: University of Maryland, 2012. 179 f. Dissertação (Doutorado) University of Maryland, College Park, 2012.