

Área: Ciências Exatas e da Terra

Estudo ab-initio de hidróxidos duplos lamelares com potencial aplicação como fertilizantes

PEDRO IVO RODRIGUES MORAES; SERGIO RODRIGUES TAVARES FLILHO; ALEXANDRE AMARAL LEITAO

Departamento de Química - ICE

As argilas aniônicas, também conhecidas como hidróxidos duplos lamelares (HDL) ou compostos tipo hidrotalcita, são bem conhecidas pelo grande potencial de aplicação tecnológica e industrial como catalisadores, suporte para catalisadores, precursores de catalisadores e materiais filtrantes ou adsorventes. A estrutura dos HDL é composta por lamelas carregadas positivamente, devido a uma mistura de cátions divalentes e trivalentes, cuja carga é contrabalaneada por ânions intercalados na região interlamelar. Além dos ânions, a região interlamelar dos HDL é ocupada por moléculas de água, formando o empilhamento característico destes compostos. Tais ânions podem ser trocados em diversas condições e para muitos diferentes fins. No caso de serem nutrientes, podem ser trocados por carbonato, formado a partir de e vapor d'água presentes no ar, e serem liberados de forma lenta no solo.

O objetivo principal deste projeto é gerar dados físico-químicos, a partir de simulação de estrutura eletrônica, que permitam entender e planejar o uso de HDL contendo Fe (III) em suas lamelas e ânions a base de fosfatos em sua estrutura interlamelar como fertilizantes.

Este trabalho está sendo desenvolvido com o pacote Quantum ESPRESSO, que é um software livre distribuído sob a licença pública geral GNU GPL (*General Public Licence*), cujo programa principal permite calcular energia total, densidade de carga e estrutura eletrônica de moléculas e sólidos com condições de contorno periódicas. Este código é baseado na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), usando pseudopotenciais e base de ondas planas. Como resultados principais obtidos até agora, foi criado o modelo estrutural para o compostos Mg-Fe-NaHPO₄, que revela um difratograma simulado compatível com o medido experimentalmente. Detalhes da estruturas e interações entres os constituintes interlamelares serão mostrados e discutidos.

Agradecimentos: CNPq, FAPEMIG, Vale S.A.