

Programa Institucional de Bolsas  
de Iniciação Científica PIBIC

23 a 25  
outubro

Pró-Reitoria de Pesquisa - Pibic/CNPq  
Pró-Reitoria de Graduação - SAE/Unicamp



E0656

### **MODELAGEM DA ESTRUTURA E REATIVIDADE EM ZEÓLITO: APLICAÇÃO EM CATÁLISE**

Mateus Barandas de Almeida (Bolsista ProFIS/SAE) e Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A finalidade desta pesquisa é fazer avanços no estudo sobre o Zeólito ácido H-ZSM-5 e suas interações em catálises junto às moléculas MeOH, CH<sub>3</sub>C(O)CH<sub>3</sub> e C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, através de modelagem. A modelagem é uma simulação em computador que permite obter os dados desejados. A pesquisa possibilitará o melhoramento de estudos em áreas como na criação de farmacêuticos ou em processos para obtenção de combustíveis à partir de petróleo. Até então não se obteve resultados significativos, de forma que não é possível chegar à alguma conclusão precisa.

Zeólito - Catálise - Modelagem