

Design de Líquidos Iônicos Aplicados à Captura e Separação de Gases

Giane B. Damas (PG)¹, Luciano T. Costa(PQ)^{2*}

ltcosta@id.uff.br

¹Universidade Federal de Alfenas-MG, Rua Gabriel Monteiro da Silva, 700- 37130-000, Minas Gerais, Brasil.

²Universidade Federal Fluminense, RJ, Brasil.

Palavras Chave: Líquidos Iônicos, Captura de Gases, DFT.

Introdução

A tecnologia CCS (*Carbon Capture and Storage*) tem sido apontada como promissora para o controle de emissões de gases de efeito estufa, os quais têm sido extensivamente associados às alterações climáticas globais.¹ Tal tecnologia pode ser aplicada em plantas de queima de carvão e gás para geração de energia, e consiste na captura de CO₂ a partir do uso de um solvente específico, como o metanolamina (MEA), transporte e armazenamento.² Neste sentido, os Líquidos Iônicos (LI) são materiais com potencial para utilização nesse processo, devido a propriedades como: baixa pressão de vapor, baixo ponto de fusão, alta estabilidade e capacidade de dissolução de gases.³ Desta forma, o objetivo deste trabalho é a avaliação dos mecanismos de interações de LI com os gases CO₂, SO₂ e H₂S para o *design* de materiais potenciais para captura de gases. Dividido em três partes, o trabalho consiste na avaliação do papel do cátion e do ânion sobre as interações do gás com o LI; interações cátion-ânion com efeito na solubilidade e interação CO₂-par iônico.

Resultados e Discussão

Cátions: família do imidazólio, tetraalquilamônio e imidazólio funcionalizado com grupamentos éter;

Ânions: a família de halogenetos, ânions fluorinados, [acetato] e ânions [sulfato] e alquilsulfato.

Pares Iônicos [C_nmim]X, em que X= [BF₄], [Tf₂N]⁻, [MeSO₄]⁻, [PF₆]⁻, [EtSO₄]⁻, [C_nmim][Tf₂N] e pares com cátion funcionalizado com grupamento interação CO₂-par iônico foi avaliada em sistemas [C_nmim][Tf₂N], n=1,2,4,6 e 8.

✓ Otimização: 4 configurações. Níveis de teoria: B3LYP/6311+G** e M06-2X/6-311+G**.

✓ Foram calculadas frequências vibracionais; energia de ligação com correção de erro de superposição de *basis set* (BSSE); QTAIM; distribuição de carga e propriedades termodinâmicas, as quais estão em andamento.

Em acordo com resultados reportados, as interações ânion-gás são mais fortes que cátion-gás. A ordem da força de interação é SO₂>CO₂>H₂S;

A tabela 1 mostra os dados de energia de ligação obtidos para alguns pares iônicos baseados em imidazólio. O enfraquecimento da interação cátion-ânion exibido com o aumento da cadeia alquila do cátion está relacionado ao aumento de solubilidade,

considerando que então há mais espaços disponíveis na estrutura para a alocação do gás.

Tabela 1. Dados de energia eletrônica corrigida (E₀+ZPE) e energia de ligação (ΔE).

Sistema	E ₀ +ZPE (hartrees)	ΔE B3LYP (kJ/mol)	ΔE M062X (kJ/mol)
[C ₁ mim][Tf ₂ N]	-2132,85	-327,21	-365,40
[C ₄ mim][Tf ₂ N]	-2250,74	-317,77	-365,85
[C ₆ mim][Tf ₂ N]	-2329,33	-317,81	-360,27
[C ₈ mim][Tf ₂ N]	-2407,92	-313,41	-351,87

Desta forma, foi testado e proposto o sistema [THA][Tf₂N], (Figura 1). Com energia de ligação de e -274,86 kJ/mol (B3LYP), este sistema mostra-se promissor para futuras aplicações.

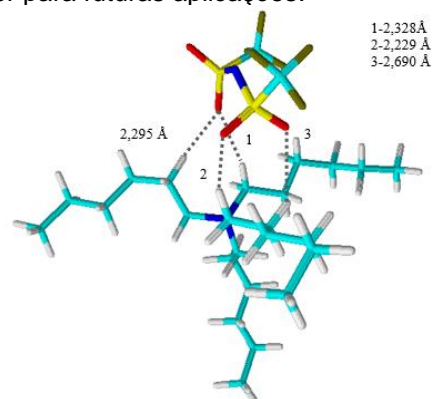


Figura 1. Estrutura otimizada para [THA][TF₂N]

Conclusões

Dentre os sistemas estudados, [THA][TF₂N] mostra-se promissor para captura de gases. A próxima etapa do trabalho consiste na avaliação deste sistema com gases incluídos na estrutura, bem como o cálculo de propriedades termodinâmicas dos sistemas em estudo.

Agradecimentos

CAPES, Rede Mineira de Química, UNIFAL-MG, PPGQ-UFF.

¹ Ramdin, M. et al. *Indust. & Engin. Chem. Research.* **2012**, *51*, 8149.

² Zhang, X. et al. *Energy & Environm. Sci.* **2012**, *5*, 6668.

³ Karadas, F. et al. *Energy & Fuels.* **2010**, *24*, 5817.