

Estudo Teórico da Adsorção de CO₂ e outros Gases Leves na MOF Zn₂(BDC)₂(TED)

Brenda Sales de Lima (IC)*, Guilherme Ferreira de Lima (PQ)

*brendassales@hotmail.com

Universidade Federal de Itajubá, AV. BPS n° 1303, Bairro: Pinheirinho, Itajubá, 37500-103, Minas Gerais, Brasil

Palavras Chave: Metal-Organic Frameworks, adsorção de CO₂ e DFT

Introdução

O aumento da concentração de dióxido de carbono na atmosfera é uma das principais preocupações da sociedade moderna. Nos últimos anos, a emissão de CO₂ bateu recordes com valores superiores a 30 Gt por ano, fazendo com que a concentração desse gás atingisse o valor de 390 ppm, a maior já registrado na história.^[1]

A diminuição da concentração de CO₂ na atmosfera sem um impacto significativo no desenvolvimento industrial é uma necessidade. Para esse fim, há uma busca por materiais que consigam adsorver seletivamente o dióxido de carbono para tecnologias de captura e sequestro de carbono. Assim, *Metal-Organic Frameworks (MOFs)*, que são sólidos cristalinos porosos, com grande área superficial, formados a partir da ligação química de um nó inorgânico e um ligante orgânico divergente, surgem como materiais com enorme potencial de aplicação.^[1] Esses materiais são bastante interessantes pois as dimensões e a funcionalidade química dos poros podem ser modificadas através da escolha de ligantes orgânicos apropriados.

Neste trabalho, a interação do CO₂, CH₄ e outros gases leves com a MOF Zn₂(BDC)₂(TED) (**1**) [BDC: benzeno-1,4-dicarboxilato; TED: Trietilenodiamina], material promissor para a adsorção seletiva de CO₂,^[2] é investigada por cálculos DFT.

Metodologia

Cálculos DFT foram realizados no programa Quantum-Espresso usando um modelo periódico da MOF **1** e funcional PBE. Ondas Planas foram utilizadas com uma energia de corte de 50 Ry. Foi utilizada uma malha de 2x2x2 pontos *k* na primeira zona de Brillouin e correções de dispersão de Grimme foram utilizadas para melhorar a descrição das interações fracas.

Resultados e Discussão

Para se determinar os principais sítios de adsorção para cada gás na MOF **1**, diversas otimizações de geometria foram realizadas considerando o gás em diferentes posições dentro da cavidade do material. Assim, a interação dos gases com o ligante BDC, com o ligante TED e

38ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

próximo do nó inorgânico foram avaliados. As energias de interação foram calculadas através da equação (1) e os valores são apresentados na tabela 1.

$$\Delta E_{\text{int}} = E_{\text{MOF-gás}} - E_{\text{MOF}} - E_{\text{gás}} \quad (1)$$

Tabela 1: Energia de interação^a do CO₂ e CH₄ com diferentes sítios de adsorção de **1**.

Sítio de interação	CO ₂	CH ₄
BDC	-30,5	-19,7
TED	-	-19,1
Metais	-25,6	-14,9

a) Valores em kJ mol⁻¹.

Na Figura 1, são mostradas as estruturas otimizadas do CO₂ e CH₄ próximos ao o ligante BDC da MOF **1**.

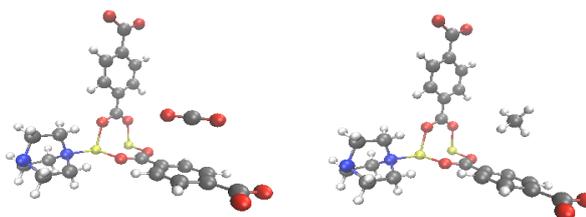


Figura 1: Interação das moléculas de CO₂ (esquerda) e CH₄ (direita) com a MOF (**1**).

Os dados mostram que em todos os sítios avaliados a interação do CO₂ é mais forte do que a do CH₄. Além disso, para ambos os gases, a interação com o ligante BDC é mais forte, mostrando a importância das interações de van der Waals, nesse caso. Cálculos de fônons para a avaliação das funções termodinâmicas do processo e cálculos avaliando o efeito da funcionalização de **1** serão apresentados.

Conclusões

Este trabalho analisa a adsorção seletiva de CO₂ na MOF Zn₂(BDC)₂(TED). Os resultados mostram uma interação mais forte do CO₂ principalmente com o ligante BDC, o que pode ser explicado por interações de van der Waals mais intensas, devido à maior polarizabilidade do CO₂.

Agradecimentos

FAPEMIG, CNPq, RQ-MG, INCT-Acqua, RQ-MG

Referências

- [1]- Sumida, K et al., Chem. Rev. **2012**, 112, 724.
[2]- Zhao, Y. et al., Chem. Eur. J. 2011, 17, 5101.