

Desenvolvimento do híbrido Cu-BTC/DEA e aplicação em adsorção de gases através de Simulação Molecular

Eduardo S. Firmino¹ (IC), **Antonia R. P. Lemos¹** (IC), **José R. Cândido-Júnior¹** (PQ) e **Adriano E. O. Lima^{1*}** (PQ)

¹ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará – Campus Iguatu, Rodovia Iguatu-Várzea Alegre km 05, s/n, Vila Cajazeiras. CEP: 63503790 – Iguatu CE. *adrianoerique@ifce.edu.br

Palavras Chave: Adsorção, Seletividade CO₂/N₂, Simulação Molecular

Introdução

Atualmente o dióxido de carbono é apontado como um dos maiores responsáveis pelo efeito estufa e aquecimento global. Assim, o desenvolvimento de tecnologias eficientes para sua captura tornou-se indispensável neste cenário. A adsorção em sólidos porosos é uma técnica com destaque nesse âmbito, principalmente com a descoberta de novos materiais adsorventes (como as MOFs) e desenvolvimento de materiais híbridos. Dessa forma, este trabalho tem como foco o estudo teórico de um novo material híbrido, objetivando encontrar melhorias na capacidade de adsorção de CO₂ e aumento de seletividade em relação ao nitrogênio. Com isso, utilizou-se a MOF Cu-BTC impregnada com dietanolamina (DEA) em diferentes concentrações. Para isso, construiu-se a MOF com base em dados cristalográficos já publicados^[1]. Recorreu-se ao campo de *Dreiding* para parametrizar os átomos de H, C e O e o campo UFF para o Cu. As cargas da MOF foram ajustadas com base no estudo de (Castillo *et al.*, 2008)^[2]. O CO₂ foi construído no modelo de três centros proposto por (Harris & Yungt, 1995)^[3], já para o N₂ utilizou-se o modelo proposto por (Ravikovitch *et al.*, 2000)^[4]. A amina foi construída com base nos dados publicados por (Alejandre *et al.*, 2006)^[5]. A construção do híbrido CuBTC_DEA foi realizada utilizando o ensemble NVT. Os ensaios de adsorção foram conduzidos com o ensemble Grande Canônico acoplado ao método de Monte Carlo (GCMC). Todas simulações foram realizadas a 298K na faixa de pressão entre 1 e 100 kPa. Utilizou-se 2x10⁶ passos de produção e de equilíbrio no sistema com cutoff de 18Å.

Resultados e Discussão

O modelo proposto foi capaz de reproduzir a tendência experimental de adsorção monocomponente de CO₂ e N₂ na Cu-BTC (ver Figura 1a). Os resultados assemelham-se a diferentes estudos experimentais^[6-8]. Em seguida, foi simulado a adsorção de uma corrente de gases contendo 15% de CO₂ e 85% de N₂ na Cu-BTC e nos híbridos com 5,3% e 21,9% de DEA incorporado. Os resultados foram satisfatórios tanto para capacidade de adsorção de CO₂ quanto na

seletividade (ver Figura 1b). O híbrido com 21,9% de DEA impregnado, por exemplo, apresentou aumento de aproximadamente 54% na capacidade de adsorção de CO₂ e uma melhoria na seletividade de 74% em relação a matriz sem modificação.

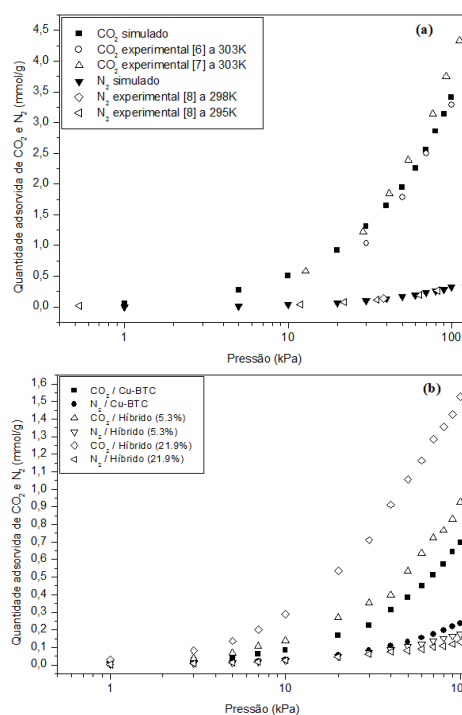


Figura 1. (a) Adsorção monocomponente de CO₂ e N₂; (b) Adsorção da mistura CO₂/N₂ nos híbridos.

Conclusões

Observou-se grandes melhorias na capacidade de adsorção e seletividade do CO₂ com o híbrido desenvolvido. Infelizmente, não há evidências experimentais de adsorção de CO₂ ou N₂ no híbrido investigado.

¹Chui, S. Y. et al., *Science*, **1999**, 283, 1148.

²J. M. Castillo, T. J. H. Vlugt and S. Calero, *J. Phys. Chem. C*, **2008**, 112, 15934.

³Harris, J. G. e Yung, K. H. *J. Phys. Chem.*, **1995**, 99, 12021-12024.

⁴Ravikovitch, P. L.; Vishnyakov, A. A.; Russo, R. e Neimark, A. V. *Langmuir*, **2000**, 16, 2311-2320.

⁵Alejandre, J.; López-Redón, R. e Mora, M. A. *J. Phys. Chem. B* **2006**, 110, 14652-14658.

⁶Hamon, L.; Jolimaître, E. e Pirngruber, G. D. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2010**, 49, 7499.

⁷Grajciar, L.; Wiersum, A. D.; Llewellyn, P. L.; Chang, J.S. e Nachtigall P. *J. Phys. Chem. C* **2011**, 115, 17927.

⁸Karra, J. R. e Walton, K. S. *Langmuir*, **2008**, 24, 16, 8623.