

# Estudo teórico da adsorção CO<sub>2</sub> na sílica mesoporosa MCM-41 modificada com alcanolaminas.

Antonia R. P. Lemos<sup>1</sup> (IC); Eduardo S. Firmino<sup>1</sup> (IC); José R. Candido-Júnior<sup>1</sup> (PQ); Adriano E. O. Lima<sup>1\*</sup> (PQ)

<sup>1</sup>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](mailto:adrianoerique@ifce.edu.br)

Palavras Chave: MCM-41, Adsorção de CO<sub>2</sub>, Simulação Molecular.

## Introdução

No contexto da problemática ambiental o CO<sub>2</sub> é visto como um dos maiores responsáveis pelo efeito estufa e conseqüentemente aquecimento global. Recentemente inúmeras tecnologias vêm sendo desenvolvidas com o intuito de capturar o CO<sub>2</sub>, a citar: absorção, destilação criogênica, separação por membranas e adsorção. Esta última tem destaque por se tratar de uma tecnologia com baixo custo energético associado. No processo de captura de CO<sub>2</sub> pós-combustão há um grande desafio tecnológico, pois o dióxido de carbono na corrente de gases de exaustão apresenta baixa pressão parcial (<1bar), alta temperatura (~348K) e alguns contaminantes, como o nitrogênio (~85%). Alguns adsorventes tem destaque nesse cenário, como as zeolitas, carbonos ativados e sílicas mesoporosas. Outra alternativa tem sido no desenvolvimento de materiais híbridos com a incorporação controlada de alcanolaminas, por exemplo. Assim, esse trabalho tem como objetivo fazer um estudo teórico da adsorção de CO<sub>2</sub> na sílica MCM-41 impregnada com as aminas monoetanolamina (MEA), dietanolamina (DEA) e metildietanolamina (MDEA). A sílica foi construída com base em dados proposto por Ho *et al.*, (2011)<sup>[1]</sup>. Inicialmente a caixa de simulação foi definida com 42.8 x 64.2 x 42.8 Å<sup>3</sup> preenchida pela matriz amorfa de cristobalita SiO<sub>2</sub>. Em seguida foram construídos quatro poros com raio de 17.5 Å. Utilizou-se o campo de força *Dreiding* para parametrizar a estrutura. O CO<sub>2</sub> foi construído no modelo de três centros proposto por (Harris & Yung, 1995)<sup>[2]</sup>. As aminas foram desenvolvidas com base no modelo proposto por Alejandro *et al.*, (2006)<sup>[3]</sup>. A construção dos híbridos foi realizada utilizando o ensemble NVT. Os ensaios de adsorção foram conduzidos com o ensemble Grande Canonical acoplado ao método de Monte Carlo (GCMC). Todas as simulações foram realizadas a 348K. Utilizou-se 2x10<sup>6</sup> passos de produção e de equilíbrio no sistema com cutoff de 18.5Å.

## Resultados e Discussão

A Figura 1a mostra que o modelo da MCM-41 foi capaz de reproduzir a tendência experimental de adsorção de CO<sub>2</sub> com similaridades a resultados experimentais<sup>[4]</sup>. Além disso, observa-se que o híbrido com 1,7% de massa de MEA incorporada no interior dos poros da sílica apresentou bons resultados no que diz respeito à capacidade de adsorção. Observa-se uma melhoria de 25% na

capacidade de adsorção de CO<sub>2</sub> a 348K e 100kPa. Os híbridos desenvolvidos com DEA e MDEA não conseguiram resultados similares possivelmente pela maior ocupação do volume de poros da sílica e redução da área superficial do adsorvente. A Figura 1b mostra a visualização após a etapa de adsorção no híbrido com 1,7% de MEA.

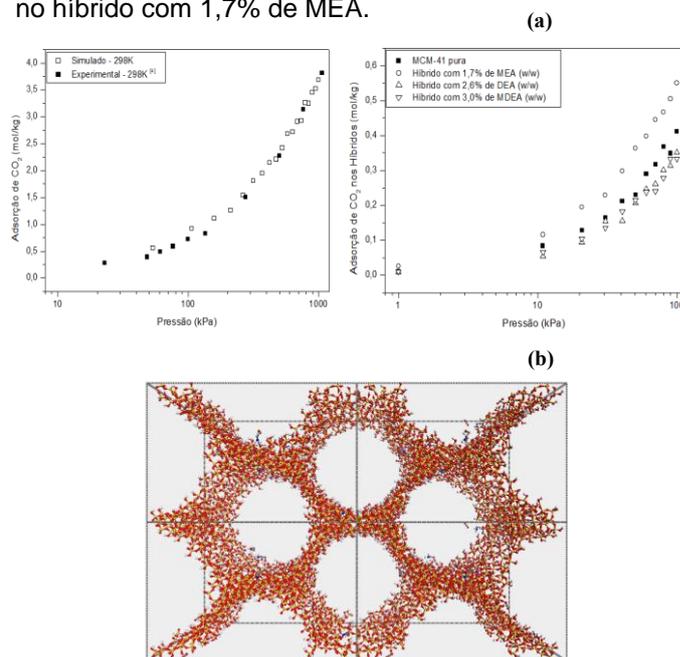


Figura 1. (a) Adsorção de CO<sub>2</sub> na sílica pura e híbridos; (b) Visualização dos poros do híbrido MCM-41/MEA.

## Conclusões

Nesse trabalho foi validado um modelo teórico de adsorção de CO<sub>2</sub> na sílica MCM-41. O estudo de adsorção nos híbridos com MEA, DEA e MDEA revelou um perfil decrescente de adsorção de CO<sub>2</sub> com o aumento da pressão, com exceção do híbrido com 1,7% de MEA incorporado. Esses resultados apontam para o surgimento de sítios de adsorção mais fortes em comparação a sílica pura. Infelizmente, não há evidências experimentais de adsorção de CO<sub>2</sub> nos híbridos investigados.

<sup>1</sup>Ho, L. N.; Pelliteco, J. P.; Porcheron, F.; Pellenq, R. J. M. *Langmuir*, **2011**, *27*, 8187.

<sup>2</sup>Harris, J. G.; Yung, K. H. *J. Phys. Chem.*, **1995**, *99*, 12021.

<sup>3</sup>Alejandro, J.; López-Redón, R.; Mora, M. A. *J. Phys. Chem., B* **2006**, *110*, 14652.

<sup>4</sup>Jing, Y.; Wei, L.; Wang, Y.; Yu, Y. *Chem. Eng. J.*, **2013**, *220*, 264.