

# Estudo teórico-experimental da rede metalorgânica MOF-5 e líquido iônico [BMIm][BF<sub>4</sub>] aplicado na captura e separação de gases

Gabriela de C. Costa<sup>1</sup>(PG), Luciano T. da Costa<sup>2</sup>(PQ)

email: costalt@gmail.com

<sup>1</sup>Universidade Federal de Alfenas, Rua Gabriel Monteiro da Silva, 700, 37130-000, Alfenas, MG.

<sup>2</sup>Universidade Federal Fluminense, Campus Valonguinho, Rua Outeiro de São João Batista, s/n, 24020-141, Niterói, RJ.

Palavras Chave: metal-organic frameworks, líquidos iônicos, gases de efeito estufa, cálculos DFT, CO<sub>2</sub>.

## Introdução

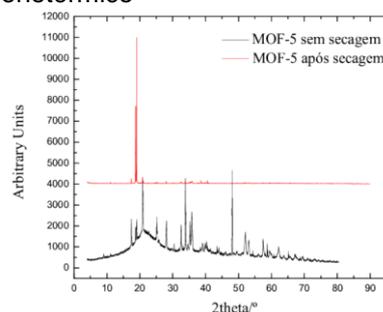
Nos últimos anos, com o aumento da população e da industrialização mundial, a demanda de energia tem crescido gradativamente. A principal fonte de energia da atualidade são os combustíveis fósseis, que aumentam a concentração de gases de efeito estufa (GEE) na atmosfera – em especial o CO<sub>2</sub>.<sup>1,2</sup> Uma das alternativas que vem sendo investigada nos últimos anos são as redes metalorgânicas, conhecidas como MOFs (do inglês *metal-organic frameworks*), estruturas formadas por íons ou clusters de metais unidos por ligantes orgânicos, apresentando alta porosidade – propriedade que os tornam materiais de interesse na adsorção de gases. Como os líquidos iônicos (LI) vêm sendo também estudados para captura de gases, foi desenvolvido um estudo teórico-experimental de um composto formado pelo MOF-5 e o líquido iônico [BMIm][BF<sub>4</sub>] com o objetivo de investigar o potencial de aplicação deste material na captura de gases.

## Resultados e Discussão

Foram obtidas duas amostras distintas, pelo método ionotérmico, sendo uma das amostras não submetida a nenhum tipo de tratamento e outra submetida a secagem à 150°C. Foram obtidos compostos cristalinos para ambas as amostras, sendo possível visualizar no difratograma da Figura 1. Pelo difratograma obtido é possível verificar a formação de cristais em ambos os casos, dado pelos padrões de difração bem definidos e sem a formação de halos. As diferenças observadas podem ser devidas ao líquido iônico em excesso presente na amostra que não foi submetida a nenhum tipo de tratamento. Já para os cálculos teóricos, é possível verificar na Tabela 1 a magnitude da energia de ligação entre o MOF-5 e moléculas presentes numa corrente de gás industrial. É possível verificar a força da interação entre o MOF-5 e os gases, que apresentaram diferenças significativas, conferindo ao MOF-5 seletividade na adsorção de determinados gases. É possível também verificar que a interação com a água foi significativamente maior, o que comprova a grande instabilidade deste MOF experimentalmente,

uma vez que 4% de água já acarreta na desestruturação do framework.<sup>3</sup>

**Figura 1.** Amostras de MOF-5 sintetizadas pelo método ionotérmico



**Tabela 1.** Valores de Binding Energy para MOF-5 e gases

Gás	Energia de Ligação (kcal/mol)
CO <sub>2</sub>	-3,15
H <sub>2</sub> O	-10,18
H <sub>2</sub> S	-3,59
SO <sub>2</sub>	-5,52
N <sub>2</sub>	-2,77

## Conclusões

Foi obtido um novo composto formado pelo MOF-5 e [BMIm][BF<sub>4</sub>] e pelos resultados teóricos, foi possível verificar a afinidade do MOF-5 pelos gases presentes em uma corrente de gás industrial. Estudos da interação com cada molécula e o sítio metálico estão sendo realizados e permitirão entender as contribuições energéticas para os fragmentos da MOF-5 em fase condensada.

## Agradecimentos

UNIFAL-MG, Capes, FAPEMIG, Rede Mineira de Química.

<sup>1</sup>SAHA, D.; BAO, Z.; JIA, F.; DENG, S. Adsorption of CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> on MOF-5, MOF-177, and Zeolite 5A. *Environmental Science & Technology*, v. 44, n. 5, p. 1820–1826, 2010. <sup>2</sup>LIU, Y.; WANG, Z. U.; ZHOU, H. C. Recent advances in carbon dioxide capture with metal-organic frameworks. *Greenhouse gases science and technology*, p. 239–259, 2012. <sup>3</sup> GREATHOUSE, J. A.; ALLENDORF, M. D. The Interaction of Water with MOF-5 Simulated by Molecular Dynamics. *JACS Communications*, v. 128, p. 10678–10679, 2006.