

# Adsorção de CO<sub>2</sub> em estruturas metalorgânicas previsto por simulação de Monte Carlo

Eduardo S. Firmino (IC)<sup>1</sup>, Virna P. Araújo (IC)<sup>1</sup>, Eder J. Melo (IC)<sup>1</sup>, José R. Candido-Júnior (PQ)<sup>1</sup>, Adriano E. O. Lima (PQ)<sup>2\*</sup>

<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.

<sup>2</sup>Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia do Ceará – Campus Tabuleiro do Norte / [\\*adrianoerique@gmail.com](mailto:*adrianoerique@gmail.com)

Palavras Chave: Adsorção de CO<sub>2</sub>; MOFs; Simulação Molecular

## Abstract

Adsorption of CO<sub>2</sub> on metal-organic frameworks from Monte Carlo Simulation. This work investigates the CO<sub>2</sub> adsorption at 298K on Cu-BTC(Cu), IRMOF-1(Zn) and UiO-66(Zr) using molecular simulation.

## Introdução

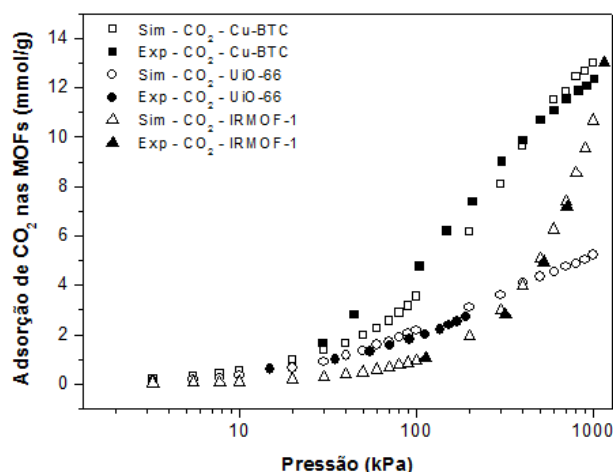
Os processos de captura, separação e armazenamento de CO<sub>2</sub> estão em pleno desenvolvimento tendo destaque a adsorção. Nesse contexto, as recentes estruturas metalorgânicas estruturadas (MOFs) estão em evidência. Dessa classe de materiais, umas das MOFs mais estáveis são a Cu-BTC (Cu), IRMOF-1 (Zn) e UiO-66 (Zr), porém dados fundamentais de adsorção mono e multicomponentes ainda são escassos. Paralelo a isso, a utilização de simulação molecular vem sendo utilizada, haja vista as facilidades na especulação de materiais antes de sua reprodução em bancada. Assim, esse estudo recorreu ao ensemble grande canônico (GCMC) utilizando-se o método de Monte Carlo para o cálculo da adsorção de CO<sub>2</sub> nas referidas MOFs. O potencial de Lennard-Jones e as contribuições eletrostáticas foram consideradas no cálculo da energia do sistema. Os ensaios foram realizados utilizando apenas uma célula unitária considerando-se a caixa de simulação rígida e com condições periódicas em todas as direções (xyz). Na parametrização do campo de força dos átomos das MOFs, utilizou-se modelos consagrados como o UFF<sup>[1]</sup>, Dreiding<sup>[2]</sup>. Para o CO<sub>2</sub>, recorreu-se ao modelo proposto por Harris & Yung (1995)<sup>[3]</sup>.

## Resultados e Discussão

A Figura 1 mostra o comparativo entre as isotermas de CO<sub>2</sub> simuladas nas MOFs Cu-BTC, IRMOF-1 e UiO-66 com dados experimentais a 298K<sup>[4-6]</sup>. Nota-se um bom ajuste do campo de força aplicado aos modelos moleculares desenvolvidos. A 100kPa, observa-se que a Cu-BTC tem a maior capacidade de adsorção de CO<sub>2</sub>, sendo capaz de reter 3,5 mmol/g em seus poros. Esse resultado é aproximadamente 73% maior que o apresentado na IRMOF-1 (0,95 mmol/g) e 39% superior que na UiO-66 (2,2 mmol/g). A explicação pela elevada capacidade de adsorção da MOF com cobre pode ser

entendida pelo histograma de energia gerado pela interação gás-MOF. Esse estudo mostra que na Cu-BTC a interação oscila no pico de 5,95 kcal/mol, enquanto na IRMOF-1 e UiO-66 os valores são em média 3,50 kcal/mol e 5,50 kcal/mol, respectivamente.

Figura 1. Adsorção monocomponente de CO<sub>2</sub> nas MOFs Cu-BTC, IRMOF-1 e UiO-66 a 298K.



## Conclusões

Nesse trabalho foram validados modelos teóricos de adsorção de CO<sub>2</sub> em três diferentes MOFs. Os resultados mostram que a Cu-BTC apresenta maior capacidade de adsorção de CO<sub>2</sub> que as outras MOFs investigadas. Sob o ponto de vista da capacidade de adsorção, a Cu-BTC mostra-se com um excelente adsorvente promissor no cenário da captura de CO<sub>2</sub>.

## Agradecimentos

Ao IFCE – Campus Iguatu e ao grupo de pesquisa NASA – IFCE.

<sup>1</sup> Mayo, S. L.; Olafson, B. D.; Goddard III, W. *J. Phys. Chem.* **1990**, *94*, 8897.

<sup>2</sup> Rappé, A. K.; Casewit, C. J.; Colwell, K. S.; Goddard III, W.; Skiff, W. M. *J. Am. Chem. Soc.* **1992**, *114*, 10024.

<sup>3</sup> Harris, J. G.; Yung, K. H. *J. Phys. Chem.* **1995**, *99*, 12021.

<sup>4</sup> Liang, Z.; Marshall, M.; Chaffee, A. L. *Energy & Fuel* **2009**, *23*, 2785.

<sup>5</sup> Zhang, W.; Huang, H.; Zhong, C.; Liu, D. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2012**, *14*, 2317.

<sup>6</sup> Millward, A. R.; Yaghi, O. M. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 17998.