

# Captura de CO<sub>2</sub> por Aminas em Líquidos Iônicos: Espectroscopia Vibracional e Cálculos DFT.

Luiz Fernando Lepre\* (PG), Rômulo Augusto Ando (PQ). \*lflepre@usp.br

Instituto de Química – USP, Laboratório de Espectroscopia Molecular – LEM. Av. Prof. Lineu Prestes nº 748 Bloco 4 – inferior, sala 411. Cidade Universitária, São Paulo – SP.

Palavras Chave: absorção de CO<sub>2</sub>, amina, líquido iônico, Raman.

## Introdução

O desenvolvimento de novas estratégias para a captura de CO<sub>2</sub> tem sido objeto de intensa pesquisa na última década. Uma alternativa promissora consiste na utilização de líquidos iônicos (IL), que dentre inúmeras vantagens em relação aos solventes orgânicos convencionais, destaca-se por apresentarem pressão de vapor negligenciável, minimizando perdas por evaporação. Duas principais abordagens utilizando esses materiais tem sido propostas: a utilização de líquidos iônicos funcionalizados com grupos amino, e a substituição da água no processo convencional de absorção por soluções aquosas de aminas.<sup>1-2</sup> O estudo das interações existentes entre as espécies, assim como seus produtos de reação, colaboram para o desenvolvimento de novos processos para captura de CO<sub>2</sub>.

Neste trabalho foi investigada a reação do CO<sub>2</sub> com diversas aminas em diferentes IL com o intuito de verificar a influência do meio no processo de captura do gás. Uma das reações mais simples investigadas foi a do CO<sub>2</sub> com a dietilamina (DEA) como mostra a Figura 1. Neste caso o líquido iônico utilizado foi o 1-butil-3-metilimidazólio bis(trifluorometilsulfonyl)imida, BMIMTFSI. Os sistemas foram investigados por espectroscopia vibracional (Raman e IR), e os resultados suportados por cálculos baseados na teoria do funcional da densidade (DFT).

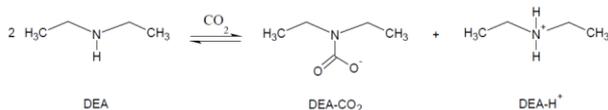


Figura 1. Reação entre dietilamina (DEA) e CO<sub>2</sub>.

## Resultados e Discussão

A Figura 2 mostra os espectros Raman experimentais e calculados da dietilamina pura (DEA), após a reação com CO<sub>2</sub> (DEA-CO<sub>2</sub>) e em solução de IL (DEA-IL-CO<sub>2</sub>). No caso da reação do CO<sub>2</sub> com a amina pura pode-se observar claramente no espectro Raman a presença de bandas características do ânion carbamato e da amina protonada. Analisando os espectros Raman calculados é possível diferenciar no espectro

experimental (DEA-CO<sub>2</sub>) as bandas provenientes de cada espécie.

No caso da reação do CO<sub>2</sub> com a amina em solução de IL, apesar das bandas do IL serem as mais intensas, é possível observar as bandas do ânion carbamato e da amina protonada. É importante mencionar que os valores de número de onda observados para as bandas características dos produtos na solução de IL apresentam-se deslocados em relação à reação com a amina pura. Isto indica que há uma interação significativa dos produtos de reação com as espécies iônicas do líquido.

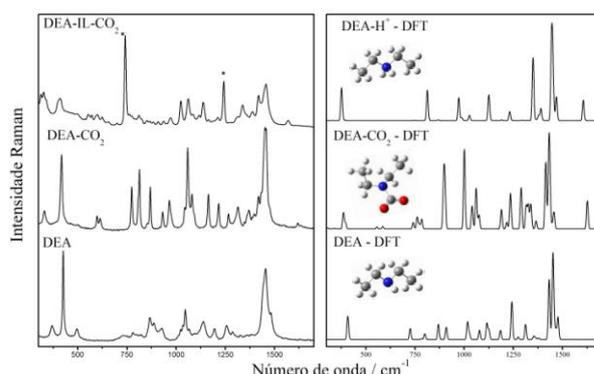


Figura 2. Espectros Raman experimentais (DEA, DEA-CO<sub>2</sub> e DEA-IL-CO<sub>2</sub>) e calculados (DEA, DEA-CO<sub>2</sub> e DEA-H<sup>+</sup>). \* refere-se à bandas do IL.

## Conclusões

Foi observado que houve a reação do CO<sub>2</sub> com a dietilamina em solução de BMIMTFSI, assim como no caso da amina pura com CO<sub>2</sub>. Entretanto foram observados deslocamentos dos números de onda das bandas características dos produtos formados na amina pura e em solução de IL, indicando que o meio pode ter influência significativa na eficiência do processo.

## Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq e à CAPES pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> Bara, J. E.; Camper, D. E.; Gin, D. L. e Noble, R. D. *Acc. Chem. Res.* **2010**, 43, 152.

<sup>2</sup> Brennecke, J. F. e Gurkan, B. E. *J. Phys. Chem. Lett.* **2010**, 1, 3459.