

# Estudo da seletividade de captura de CO<sub>2</sub> em MCM-41 modificada covalentemente com diferentes grupos amino

Thiago C. dos Santos (PG)\*, Abdoulaye Mbengue (PQ), Célia M. Ronconi (PQ)

\*custodio.thiago1@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, CEP: 24.020-150, Centro, Niterói, RJ

Palavras Chave: Captura de CO<sub>2</sub>, sílicas amino-funcionalizadas, sílicas mesoporosas, MCM-41

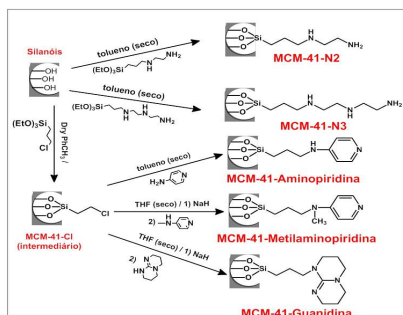
## Introdução

Os problemas ambientais causados pela grande emissão de CO<sub>2</sub> na atmosfera têm sido amenizados pelo uso de tecnologias de captura e separação de CO<sub>2</sub> (CCS). Inicialmente, o CO<sub>2</sub> é capturado e separado de outros gases (como N<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>) e posteriormente transportado e armazenado. Aminas aquosas têm sido usadas na etapa de captura e separação por serem seletivas e interagirem com CO<sub>2</sub> em baixas pressões. Contudo, a grande quantidade de energia gasta para recuperar as aminas torna o processo de CCS muito custoso.<sup>1</sup>

Nosso grupo tem relatado bons resultados pelo uso de MCM-41 amino-funcionalizada na captura de CO<sub>2</sub>.<sup>2</sup> Com o objetivo de desenvolver novos materiais que tenham uma menor energia de interação entre o adsorvente e o CO<sub>2</sub>, a sílica do tipo MCM-41 foi modificada com aminas de diversas naturezas (alifáticas, cíclicas e aromáticas) e testadas na captura de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>.

## Resultados e Discussão

Na Figura 1 são apresentadas as rotas sintéticas de obtenção dos materiais preparados neste trabalho.

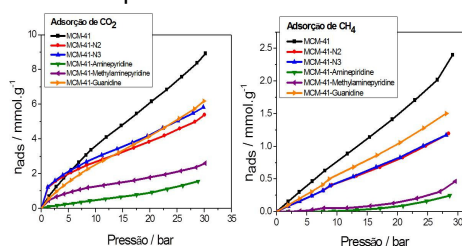


**Figura 1.** Síntese de MCM-41-N2, MCM-41-N3, MCM-41-aminopiridina, MCM-41-metilaminopiridina e MCM-41-guanidina.

Todos os materiais obtidos apresentaram sinais T<sup>3</sup> e T<sup>2</sup> no RMN de <sup>29</sup>Si indicando a formação de ligações covalentes entre as aminas e a MCM-41. Os espectros de RMN de <sup>13</sup>C no estado sólido mostraram todos os sinais esperados dos compostos ancorados na sílica. As técnicas de

microscopia eletrônica de transmissão e adsorção-desorção de N<sub>2</sub> mostraram que os materiais MCM-41-N2, MCM-41-N3 e MCM-41-aminopiridina mantiveram a estrutura mesoporosa da MCM-41 após a modificação química. Isto não ocorreu para a MCM-41-metilaminopiridina e MCM-41-guanidina.

Os estudos de adsorção de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> a 30 °C mostraram que todos os materiais apresentam maior afinidade ao CO<sub>2</sub> do que ao CH<sub>4</sub>, Figura 2. Isto é devido ao grande momento quadrupolar do CO<sub>2</sub> (13,4 x 10<sup>-40</sup> C.m<sup>2</sup>) que pode levar à interações eletrostáticas entre o CO<sub>2</sub> e grupos polares presentes na superfície dos materiais.



**Figura 2.** Isotermas de adsorção de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> na MCM-41 e materiais amino-funcionalizados.

A técnica de microcalorimetria em baixas pressões revelou que os materiais MCM-41-N2 (54 kJ/mol) e MCM-41-N3 (63 kJ/mol) interagem fortemente com CO<sub>2</sub>, o que explica a maior captura de CO<sub>2</sub> nestes materiais. Estas interações ainda foram confirmadas pela presença de um sinal em 164 ppm no RMN de <sup>13</sup>C, que foi atribuído à formação de espécies carbamato.<sup>2</sup>

## Conclusões

Todos os materiais obtidos apresentaram maior seletividade ao CO<sub>2</sub> em relação ao CH<sub>4</sub>. A forte interação do CO<sub>2</sub> com os materiais MCM-41-N2 e MCM-41-N3 resultou em uma maior capacidade de adsorção. Essas características indicam que estes materiais podem ser usados na CCS.

## Agradecimentos

CAPES, Prof. Victor Rumjanek (IQ-UFRRJ) e Philip L. Llewellyn (Universités d'Aix-Marseille, França)

<sup>1</sup> Santos, T. C.; Ronconi, C. M., *Rev. Virtual Quim.*, artigo no prelo (2014). <sup>2</sup> Ronconi, C. M.; et al., *Micropor. Mesopor. Mat.* **2011**, *143*, 174.