

Simulação de Processos de Adsorção Molecular em Material Nanoporoso Constituído por Tereftalato e Zircônio

Carla Vieira Soares^{a*} (PG), Alexandre A. Leitão^a (PQ), Naseem A. Ramsahye^b (PQ),
Guillaume Maurin^b (PQ)

^a Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Brasil.

^b Institut Charles Gerhardt Montpellier, UMR 5253 CNRS, École Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier, Montpellier, France.

*e-mail: carlavieira@ice.ufjf.br

Palavras-chave: Metal-Organic-Frameworks, Adsorção, Cálculos *Ab initio*.

INTRODUÇÃO

Metal organic frameworks (MOFs) são constituídos por uma extensa rede de íons ou *clusters* metálicos coordenados a moléculas orgânicas multidentadas em dimensões porosas bem definidas. Esses materiais agrupam características relevantes, como: alta porosidade; elevada área superficial interna e existência de forte interação metal-ligante.¹ MOFs têm atraído muito interesse devido à aplicações em purificação, separação e estocagem de gases. Recentemente MOFs constituídos por metais tetravalente e carboxilato têm despertado interesse devido a alta estabilidade da unidade secundária de construção (SBU) que sugere uma elevada estabilidade química, térmica e forte resistência à água. Neste trabalho foi utilizado a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) afim de propor um modelo estrutural para o MIL-140A² (Fig. 1) e em seguida investigar a adsorção das moléculas: CO₂, CO, N₂, CH₄, H₂S e C₄H₄S, avaliar a seletividade e a estabilidade em água.

METODOLOGIA

Este trabalho está sendo desenvolvido com o pacote *Quantum-ESPRESSO*, cujo programa principal *Pwscf* permite calcular a estrutura eletrônica de moléculas e sólidos com condições de contorno periódicas. Este pacote é baseado na DFT e utiliza pseudopotenciais e um conjunto de bases de autofunções dado por ondas planas³.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O modelo proposto otimizado a partir de uma estrutura cristalográfica experimental². No intuito de verificar a validade do modelo foram realizados as seguintes simulações: difratograma de raios X por policristais, espectro vibracional e

parâmetros de RMN de ¹³C. Os resultados estão em boa concordância com os experimentais. Em seguida foram selecionados os melhores sítios onde as moléculas foram adsorvidas. Uma simples comparação da energia eletrônica mostra que seletividade decresce na seguinte ordem: C₄H₄S > CO₂ > H₂S > CH₄ > CO > N₂ > H₂. Afim de verificar a estabilidade foi proposto a reação de hidrólise (Fig. 1), no limite p_{H2O}/p₀=0 a temperatura tende ao infinito, logo, o material se mostra estável a consideráveis pressões relativas de água e altas temperaturas.

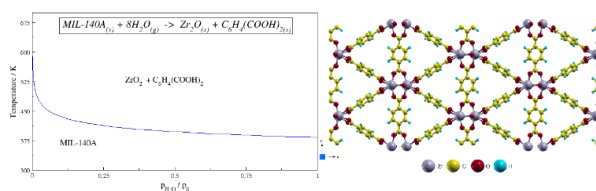


Figura 1. Diagrama de fases e estrutura otimizada do MIL-140A.

CONCLUSÃO

Os resultados demonstram que o MIL-140A é estável na presença de moléculas de água e portanto pode servir como plataforma ideal na remoção de gases como CO₂ proveniente de gases de combustão, gás de síntese e biogás.

AGRADECIMENTOS

FAPEMIG, CAPES, CNPQ pelo apoio financeiro e CENAPAD-SP pelo suporte computacional.

¹ V. Guillerm, F. Ragon, M. Dan-Hardi.; *et al.* Angew. Chem. 51, 9267, (2012).

² Z. Hasan, S. H. Jung. J. Hazardous. Mater. 283, 329, (2015).

³ J. Giannozzi, P.; Baroni, S.; Bonini, N.; *et al.* J. Phys. Condens. Matter. 21, 395502, (2009).