

Estudo de Captura de CO₂ em Materiais Porosos: ZIF-78 e similares

Emanuel Fernandes Dias Mancio

Kaline Coutinho

Instituto de Física – Universidade de São Paulo

emanuelmancio@usp.br

Objetivos

Estamos realizando modelagem molecular para estudar nanopartículas de materiais cristalinos porosos conhecidos como Metal Organic Framework (MOF). Em particular estudou-se a MOF ZIF-78 composta por átomos de Zn²⁺ tetra-coordenados com os grupos orgânicos de nitro- e benzonitro-imidazol [1] interagindo com os gases abundantes na atmosfera como N₂, O₂ e Ar, vapor de água e CO₂. Assim, buscou-se compreender a seletividade e capacidade de captura de CO₂ desta MOF e o efeito da umidade neste processo.

Métodos e Procedimentos

Usamos cálculos de mecânica quântica e simulações computacionais com campo de força clássico para descrever as interações da ZIF-78 com as moléculas de interesse [2]. Inicialmente realizamos cálculos de cargas atômicas para descrever a densidade eletrônica da ZIF-78 e em seguida realizamos modificações nos parâmetros do campo de força clássico para garantir a estabilidade da nanopartícula e similaridade com a estrutura cristalográfica. Por fim, realizamos simulações da nanopartícula embebida nos gases e analisamos a captura interna e na superfície da MOF.

Resultados

Identificamos que conforme aumenta se o empacotamento da nanopartícula ZIF-78, a quantidade de pares de átomos de Zinco superficiais com distâncias próximas de 6Å também aumenta. Em especial, a face 100 quase todos os pares de Zn têm esta característica que é importante devido ao

favorecimento da interação com CO₂ comparativamente a outras moléculas do gás atmosférico. Na Tabela 1 mostramos que a captura de CO₂ é mais eficiente que de H₂O, entretanto a presença de umidade diminui drasticamente a capacidade de captura de CO₂ da ZIF-78.

Tabela 1: Densidade dos gases capturados no ZIF-78 (moléculas/nm³), energia de interação E (kcal/mol) e a coordenação N das moléculas dos gases nos átomos de Zn na superfície. Em parênteses está o desvio padrão.

Gás	Dens.	E	N
CO ₂	8.7(5)	-17(3)	4.7
H ₂ O	0.9(2)	-71(7)	4.2
Mistura(1:1) CO ₂ :H ₂ O	4.5(5):3.2(4)	0:-68(7)	0:5.0

Conclusões

Concluimos que os átomos de Zn na superfície da nanopartícula são sítios importantes de interação com as moléculas dos gases e o uso da MOF ZIF-78 para captura de CO₂ deve ser usada apenas em gases desidratados para aproveitar toda a sua habilidade de captura.

Referências Bibliográficas

- [1] Banerjee, R.; Furukawa, H.; Britt, D.; Knobler, C.; O'Keeffe, M.; Yaghi, O. M. *Journal of the American Chemical Society* 2009, 131, 3875–3877.
 [2] H. M. Cezar, S. Canuto, K. Coutinho, J. Mol. Liq. 307 (2020) 112924