



SEPARAÇÃO DE COMPONENTES DO GÁS NATURAL PELAS MOFs CrOFOUR-1-Ni E MoOFOUR-1-Ni: UMA ANÁLISE TEÓRICA

Herick Ribeiro Torres^{1*}, Heitor Avelino de Abreu¹, Guilherme Ferreira de Lima¹

¹ Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Química, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil, CEP.31270-901

*e-mail: herick.rtorres@gmail.com

Para atender às propostas da Convenção-Quadro das Nações Unidas sobre Mudança do Clima (UNFCCC) realizada em 2015, o gás natural tem sido estudado como uma matriz energética de transição devido à sua baixa emissão de gases de efeito estufa^[1]. No entanto, ele contém compostos indesejáveis, como CO₂, N₂, NO_x, H₂S e alguns hidrocarbonetos leves (C₂₋₄H₅)^[2]. A busca por materiais capazes de separar esses gases se tornou um campo de desenvolvimento científico significativo, tendo as redes metalorgânicas (MOFs) sendo fortes candidatas para esse propósito^[3,4]. Portanto, este estudo visa investigar como as MOFs CrOFOUR-1-Ni e MoOFOUR-1-Ni funcionam na separação de gases presentes no gás natural. Para esse propósito, foi utilizado o formalismo da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) com o pacote de simulação do Quantum Espresso^[5] para a otimização estrutural, apresentando um erro médio de menos de 0,01% nos parâmetros de rede. A simulação da isoterma de adsorção de CO₂ foi realizada no programa RASPA^[6] (Figura 1), mostrando boa concordância com os resultados experimentais. A adsorção de outros hidrocarbonetos leves será apresentada.

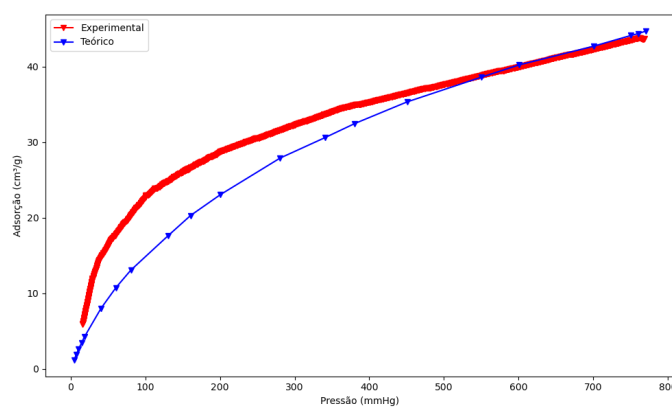


Figura 1: Adsorção do CO₂ na MOF CrOFOUR-1-Ni

Agradecimentos: CNPq, CAPES, UFMG, GPQIT, ACQUA, RENOVAMin, FAPEMIG.

[1] IEA (2023), Energy Statistics Data Browser, IEA, Paris. Disponível em: <https://www.iea.org/data-and-statistics/data-tools/energy-statistics-data-browser>.

[2] FARAMAWY, S.; ZAKI, T.; SAKR, A.-E. Natural gas origin, composition, and processing: A review. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, Elsevier, v. 34, p. 34–54, 2016.

[3] GRIGOLETTO, Sabrina et al. Dynamical and electronic properties of anion-pillared metal–organic frameworks for natural gas separation. *Physical Chemistry Chemical Physics*, v. 25, n. 40, p. 27532-27541, 2023.

[4] SAHOO, R.; DAS, M. C. C2s/c1 hydrocarbon separation: The major step towards natural gas purification by metal-organic frameworks (mofs). *Coordination Chemistry Reviews*, Elsevier, v. 442, p. 213998, 2021.

[5] GIANNIOZZI, Paolo et al. Quantum ESPRESSO toward the exascale. *The Journal of chemical physics*, v. 152, n. 15, 2020.

[6] DUBBELDAM, David et al. RASPA: molecular simulation software for adsorption and diffusion in flexible nanoporous materials. *Molecular Simulation*, v. 42, n. 2, p. 81-101, 2016.