

ESTUDO DA ADSORÇÃO DE METANO EM MIL-101(Cr) ATRAVÉS DE SIMULAÇÃO MOLECULAR

Daniel Vasconcelos Gonçalves, Sebastião Mardonio Pereira de Lucena
Bolsista PRH-ANP 31, daniel@gpsa.ufc.br, Departamento de Engenharia Química, Centro de Tecnologia, Universidade Federal do Ceará.

R E S U M O

MOTIVAÇÃO:

O gás natural, que é composto majoritariamente por metano, apresenta características que o classificam como o mais limpo dentre os combustíveis fósseis, como por exemplo, a baixíssima emissão de dióxido de enxofre e de resíduos do processo de combustão. Devido à tendência global de consumo de combustíveis mais limpos, o gás natural surge como uma importante alternativa para suprir o aumento das necessidades de energia do mundo.

As estruturas metal-orgânicas (MOFs) são uma classe de materiais altamente porosos que têm apresentado propriedades químicas e estruturais bastante favoráveis à adsorção. Estas características tornam-nas bastante promissoras para diversas aplicações dentre as quais se destacam a separação e o armazenamento de gases. A MIL-101(Cr) é uma estrutura metal-orgânica com poros gigantes que se caracteriza pela presença de tetraedros microporosos que se conectam para a formação de cavidades mesoporosas. Esta estrutura em particular apresenta uma elevada capacidade de armazenamento de metano à temperatura ambiente.

OBJETIVO:

Através do método de Monte Carlo aplicado ao *ensemble* grande canônico, avaliar campos de forças genéricos e diferentes modelos da molécula de metano para a representação de isotermas experimentais de metano em MIL-101(Cr) à temperatura ambiente. Estimar energias dos sítios de adsorção.

APLICAÇÃO NA INDÚSTRIA DO PETRÓLEO:

O maior problema para uma maior utilização do gás natural é o elevado custo de transporte devido à dificuldade de alcançar altas densidades. A forma mais comum para estocar gás natural é através da compressão, porém pressões elevadas são requeridas (aproximadamente 20 MPa). Motivados por essa desvantagem, vários estudos do uso de gás natural adsorvido têm sido realizados. Se o gás natural for estocado na forma de gás natural adsorvido, a pressão requerida no reservatório pode ser consideravelmente menor (cerca de 3,5 MPa), que implica em menores custos na construção e compressão do reservatório, sem contar no aumento na segurança operacional.

RESULTADOS OBTIDOS:

Avaliou-se dois campos de força genéricos, Universal (UFF) e DREIDING, para a representação da interação sólido-sólido da MIL-101(Cr) e dois modelos para a molécula de metano, átomo unitário (UA) e átomo-átomo (AA). Através da utilização do campo de força UFF em conjunto com modelo UA para o metano conseguiu-se uma boa representação da isoterma experimental à 298 K. Na estimativa das energias dos sítios de adsorção, obteve-se um valor de energia de 4,4 kcal/mol para o tetraedro microporoso e 2 kcal/mol para as cavidades mesoporosas. Estes valores justificam uma ocupação prioritária dos tetraedros em detrimento das cavidades mesoporosas.