

CAPTURE DE CO₂ UTILIZANDO O GLICEROL COMO SOLVENTE VERDE E SUSTENTÁVEL: ESTUDOS TEÓRICOS E EXPERIMENTAIS

Congresso Online Nacional de Química, 3ª edição, de 29/03/2021 a 01/04/2021
ISBN dos Anais: 978-65-86861-93-8

FURTADO; Isabelle Oliveira ¹, SANTOS; Thiago Custódio dos², FIOROT; Rodolfo Goetze³, CARNEIRO; José Walkimar de M. ⁴, RONCONI; Célia Machado⁵

RESUMO

O crescimento das emissões de dióxido de carbono (CO₂) a partir de fontes antropogênicas vem sendo considerado uma das principais causas do aumento do aquecimento global. As consequências das alterações no sistema climático devido ao aumento dessas emissões já são notáveis e vêm afetando severamente os ecossistemas, a saúde humana e a vida marinha. Apesar do método de captura de CO₂ utilizando soluções aquosas de alcanolaminas ser uma tecnologia bem estabelecida nas indústrias e usinas termelétricas, a mesma apresenta algumas desvantagens, como por exemplo, a alta demanda de energia e água que é exigida nesse processo. Portanto, o desenvolvimento de novas metodologias de separação de CO₂ que superem essas limitações é de suma importância. Nesse trabalho, empregamos a Teoria Funcional da Densidade (DFT) para investigar o potencial de diferentes misturas compostas por glicerol e bases nitrogenadas na captura de CO₂. Ao combinar o glicerol, o CO₂ e as bases nitrogenadas, observou-se que as aminas alifáticas são capazes de interagir com a hidroxila primária do glicerol por ligações de hidrogênio, aumentando sua nucleofilicidade e permitindo sua reação com o CO₂ para a formação de um carbonato de glicerol como produto mais estável. Para confirmar se o carbonato de glicerol seria obtido experimentalmente a partir da mistura, selecionamos a trietilamina (TEA) como base para ativar o glicerol (Gly) na reação com o CO₂. O produto obtido foi caracterizado por espectroscopia na região do infravermelho com transformada de Fourier por refletância total atenuada (ATR-FTIR), ressonância magnética nuclear em 1D e 2D (RMN de ¹H e ¹³C) e análise termogravimétrica (TGA). Os resultados de ATR-FTIR mostraram a protonação da TEA após borbulhar o CO₂ na mistura inicial TEA-Gly, sugerindo que a reação com o CO₂ ocorre após a desprotonação do glicerol, formando um carbonato orgânico, que também foi confirmado pelos espectros de RMN. Os resultados teóricos e experimentais indicam que a TEA é capaz para ativar o glicerol, possibilitando a reação do CO₂ para a formação de carbonatos orgânicos. O produto carbonato é mais atrativo no ponto de vista industrial do que o produto carbamato, que é obtido nos atuais métodos de separação de CO₂ empregados nas indústrias, por apresentar menor toxicidade e exigir uma menor temperatura na etapa de regeneração dos reagentes. Portanto, a metodologia desenvolvida neste trabalho pode ser considerada como uma nova alternativa promissora de captura de CO₂, já que a mesma valoriza a utilização do glicerol, o principal subproduto das indústrias de Biodiesel, sendo considerado um solvente verde, biodegradável, de alta disponibilidade e baixo custo.

PALAVRAS-CHAVE: Cálculo DFT, carbonatos orgânicos, trietilamina

¹ Universidade Federal Fluminense - UFF, ifurtado@id.uff.br

² UFF, thiagocustodio@id.uff.br

³ UFF, rodolfofirot@id.uff.br

⁴ UFF, jolse_walkimar@id.uff.br

⁵ UFF, cmronconi@id.uff.br