



# Adsorción de CO<sub>2</sub> en materiales carbonosos obtenidos mediante síntesis química

**Alberto G. Albesa\***,

INIFTA (Depto. de Química, Fac. Cs. Exactas, UNLP, CICPBA, CONICET)  
Casilla de Correo 16, Sucursal 4, (B1904DPI), La Plata, RA

[albesa@inifta.unlp.edu.ar](mailto:albesa@inifta.unlp.edu.ar)

## Introducción

Para reducir las emisiones de dióxido de carbono, se han desarrollado varias técnicas, sin embargo, la adsorción utilizando materiales sólidos como adsorbentes ha despertado un gran interés ya que su uso requiere poca energía, es posible regenerar los materiales y por su sencillez en la implementación. La atención se centra principalmente en los carbones activados, ya que son materiales que tienen una gran superficie específica, una amplia variedad de química superficial y, sobre todo, un costo relativamente bajo. El problema es que los carbones activados son materiales amorfos y sus estructuras no se han podido caracterizar con precisión hasta el día de hoy. Esta falta de caracterización conduce a que la síntesis de carbones activados para fines específicos se convierta en una tarea complicada ya que es difícil manejar parámetros como la distribución de tamaños de poros, la química superficial antes mencionada e incluso lograr uniformidad en las superficies específicas.

En este trabajo examinamos, utilizando simulaciones de Monte Carlo, las capacidades de adsorción y los calores isostéricos de adsorción de nuevos materiales que han sido sintetizados en el laboratorio y que tienen una estructura cristalina: Carbon Nanocone by Cascade Annulation {1}, Highly Twisted Nonplanar Aromatic Macrocycles Enabled by an Axially Chiral 4,5-Diphenylphenanthrene Building Block {2}, Corannulene-Based Nanographenes {3} and Three-Bladed Rylene Propellers with Three-Dimensional Network {4}

## Materiales simulados

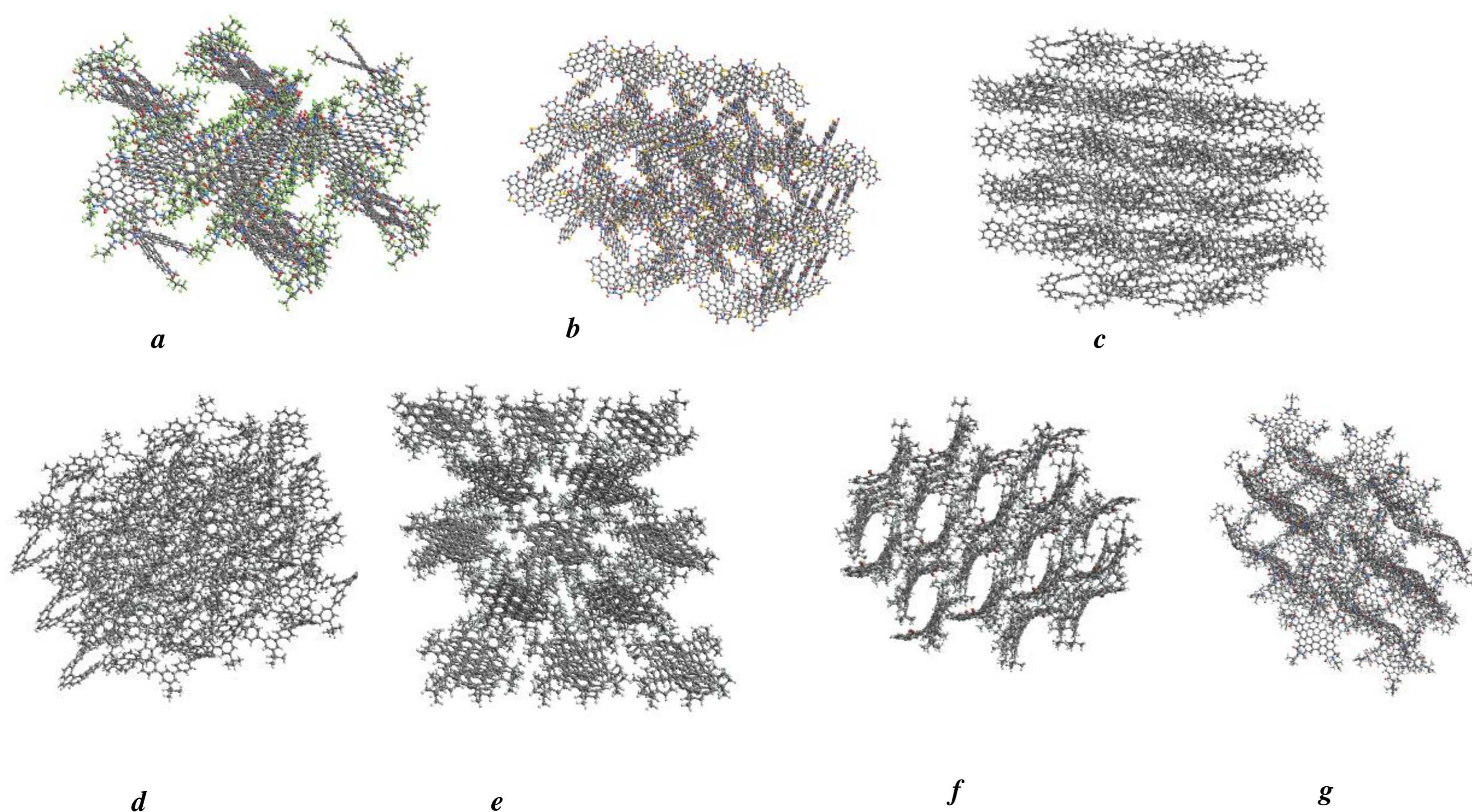


Figura 1. Estructuras cristalinas de los materiales simulados a)TPH b)TPH-Se c)C68 d)C72 e)COR f)CORCl g)CNC

## Simulaciones

Se realizaron simulaciones Monte Carlo en el conjunto Gran Canónico. Se simularon isothermas de adsorción de Argón a 77K y de Dióxido de Carbono a 77 K. A partir de los resultados de las isothermas se estudió la superficie específica mediante el método BET y las distribuciones de tamaños de poros utilizando DFT y el modelo de Horvath-Kawazoe.

## Referencias

{1}Shoyama, K., et al. (2019). Synthesis of a Carbon Nanocone by Cascade Annulation. Journal of the American Chemical Society, 141(33), 13008-13012.

{2}Li, Y., Yagi, Aet alK. (2020). Synthesis of Highly Twisted, Nonplanar Aromatic Macrocycles Enabled by an Axially Chiral 4, 5-Diphenylphenanthrene Building Block. Journal of the American Chemical Society, 142(6), 3246-3253.

{3}Fernandez-Garcia, J. M., et al(2018). Pi- extended corannulene-based nanographenes: selective formation of negative curvature. Journal of the American Chemical Society, 140(49), 17188-17196.

{4}Meng, D. et al. Y. (2016). Three-bladed rylene propellers with three-dimensional network assembly for organic electronics. Journal of the American Chemical Society, 138(32), 10184-10190.

## Resultados

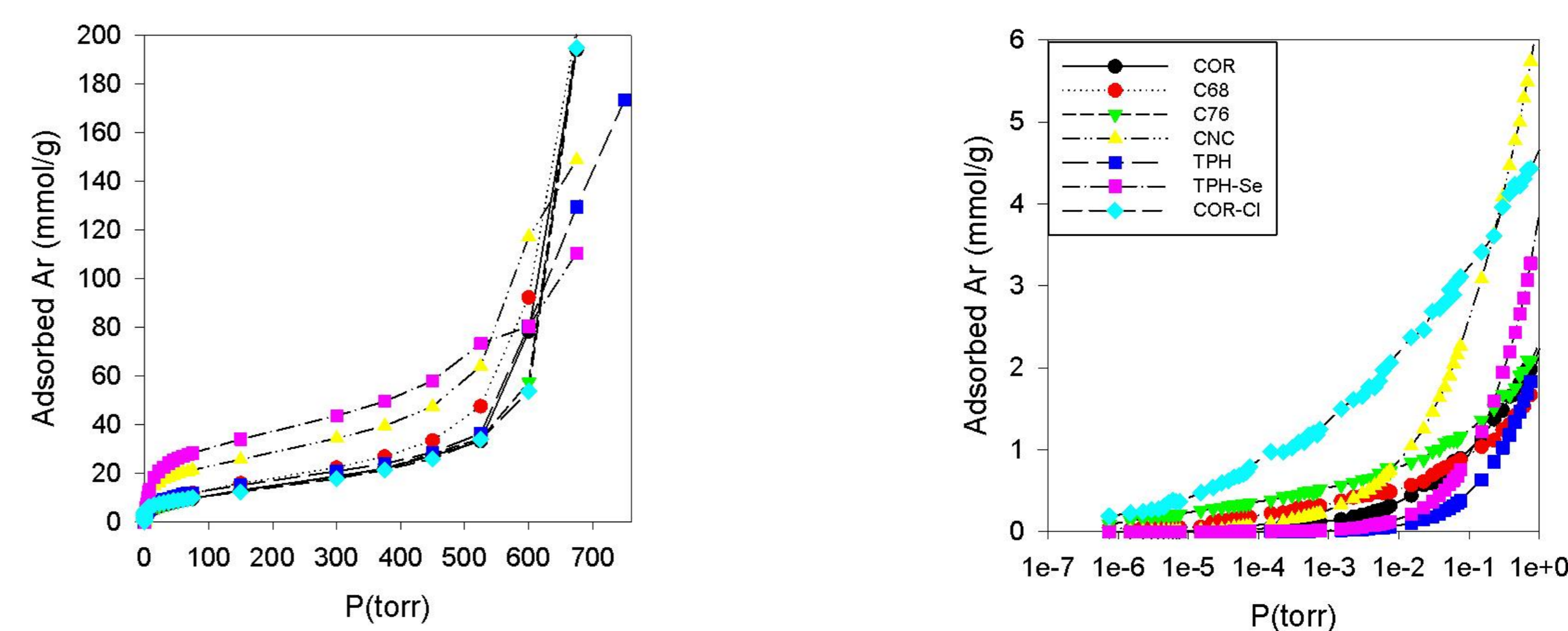


Figura 2 – Isothermas de adsorción de Argón sobre los materiales cristalinos

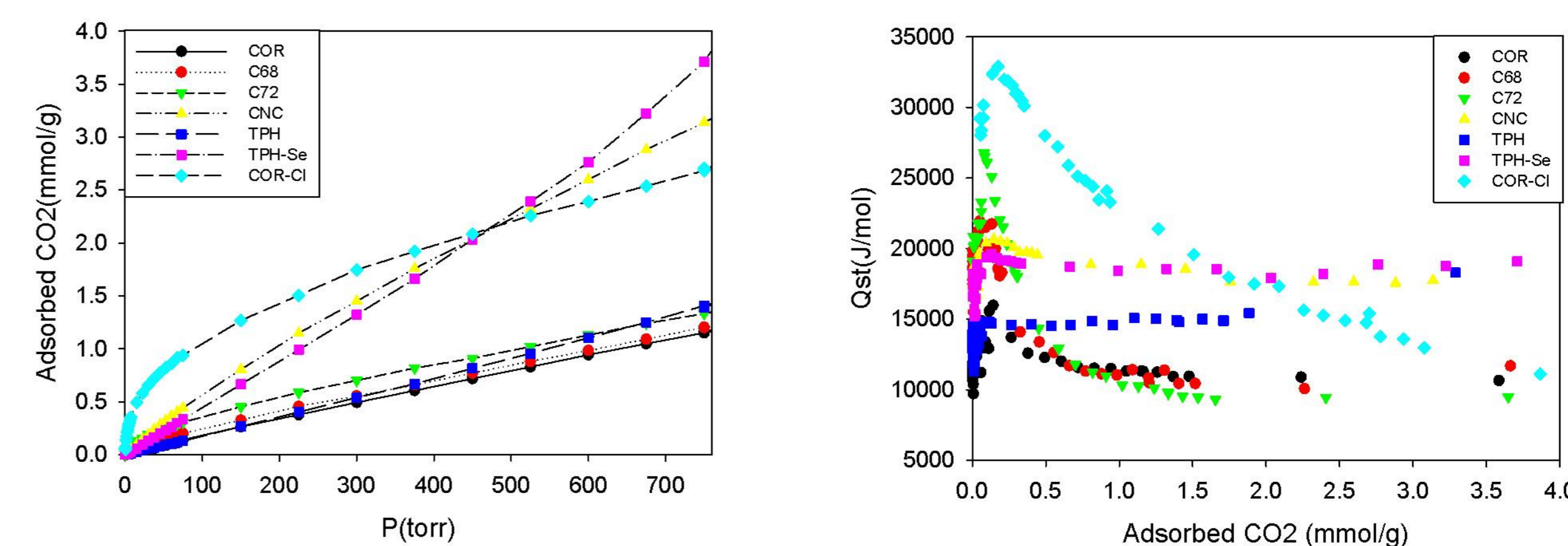


Figura 3 –a) Isothermas de adsorción de Dióxido de carbono sobre los materiales cristalinos b) Calores isostéricos de adsorción

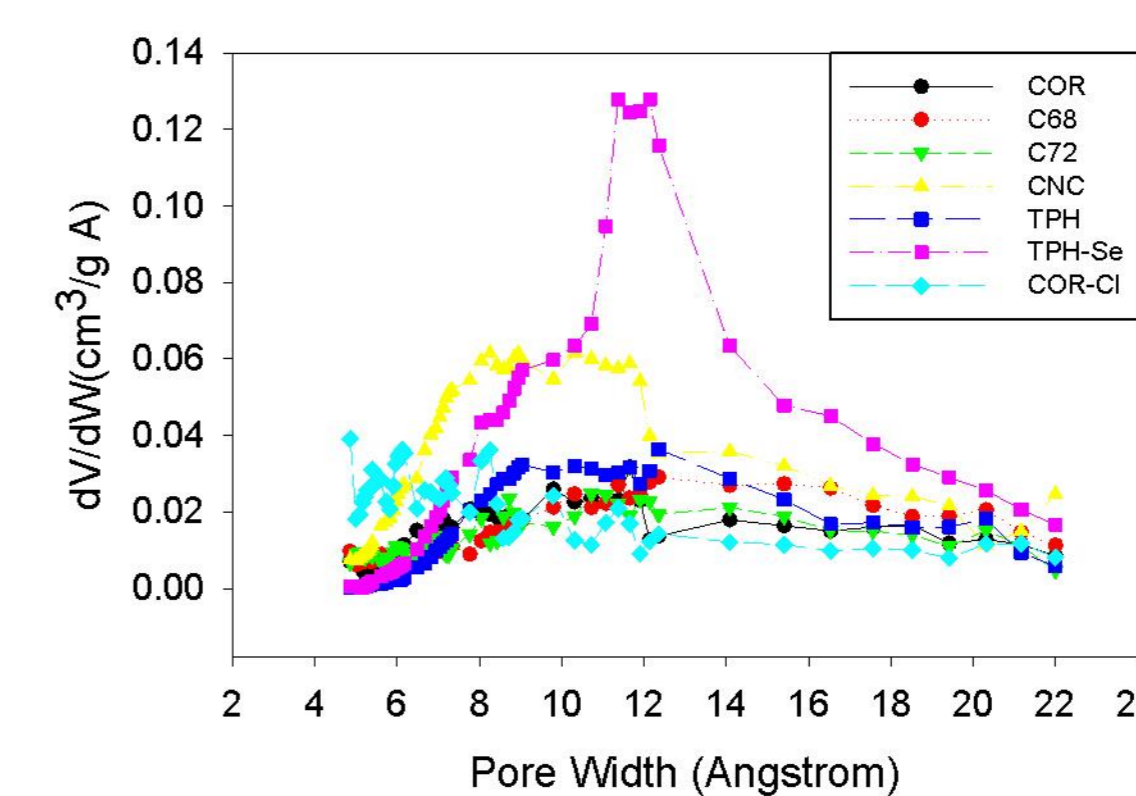


Figura 4. Distribución de tamaños de poros obtenidas mediante el método HK para las isothermas de Ar

La Figura 3 muestra la isoterma de adsorción de CO<sub>2</sub> a 273 K. La capacidad volumétrica de adsorción de CO<sub>2</sub> de las nanoestructuras a 1 atm y 273 K disminuyó en el orden de TPH-Se > CNC > COR-Cl > TPH > C72 > C68 > COR. Para explicar este orden tenemos en cuenta la superficie específica, que explicaría en términos generales la tendencia. Sin embargo, la adsorción de CO<sub>2</sub> en COR-Cl es mucho mayor de lo que se puede atribuir solo a este factor. A partir de los resultados obtenidos por el análisis de PSD, se encuentra que los poros más pequeños se encuentran en el sustrato C72, el sustrato con mayor volumen de microporos es COR-Cl y que tanto TPH como TPH-Se prácticamente no tienen ultramicroporos. Esta distribución de tamaño explica en gran medida la forma de la isoterma de adsorción, ya que se puede observar que a bajas presiones el CO<sub>2</sub> se adsorbe principalmente en los pequeños poros que el COR-Cl posee, generando una curva tipo I, según la nomenclatura utilizada por IUPAC

## Conclusiones

En el presente trabajo hemos estudiado la adsorción de CO<sub>2</sub> sobre materiales orgánicos cristalino. Estos materiales podrían tener ventajas cuando se utilizan como adsorbentes para la recuperación de CO<sub>2</sub>. También es importante señalar que el calor isostérico de adsorción de estos nuevos materiales es considerablemente menos que eso en los carbones activados, lo que permitiría un uso más eficiente