



UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

INSTITUTO DE QUÍMICA

Paula Almeida Silva

Glicerol como Agente Sequestrante de CO₂: Uma Exploração Químico-Computacional

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Brasília – DF

2º/2020



UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

INSTITUTO DE QUÍMICA

Paula Almeida Silva

Glicerol como Agente Sequestrante de CO₂: Uma Exploração Químico-Computacional

Trabalho de Conclusão de Curso em Química Tecnológica apresentada ao Instituto de Química da Universidade de Brasília, como requisito parcial para a obtenção do título de bacharel em Química Tecnológica.

Orientador: Prof. Dr. Daví Alexandro Cardoso Ferreira

Coorientadora: Profa. Dra. Simone Monteiro e Silva

2º/2020

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço minha mãe, por todo o apoio financeiro e emocional durante esses sete anos de curso. Por todos os conselhos, ajuda em mudanças (que não foram poucas) e comidas favoritas feitas enquanto eu estive em Goiânia descansando.

Ao meu irmão, Yuri, que sempre puxou minha orelha me motivando a ser melhor. Vovós Belmira (em memória) e Darcy, e vovô Pires. Max Filho, meu afilhado. Jack, meu cachorrinho. À minha família, que sempre acreditou em mim.

Aos amigos que conheci na escola e cursinho, e que me acompanham até hoje: Miriam, que me incentivou bastante a entrar na UnB e no Política na Escola, me possibilitando conhecer pessoas incríveis lá, além de gostar de ouvir minhas histórias; Orion, pelos desabafos sem fim; Hygor, pela amizade desde o Jardim II e Douglas, pelas partidas de carta nos finais de semana. Larissa e Ítalo.

À Rayane, minha melhor amiga desde o segundo dia de aula, minha dupla de laboratório, minha parceira nas matérias, nos passeios de shopping, nos desesperos da universidade e nas filas intermináveis do RU. À Bruna, por ser minha companheira na Embrapa: pegando água destilada, carregando planta e saco de substrato, além de me dar carona. Ao Rafael, pelo companheirismo nas aulas de físico-química e nas músicas pop. Ao Wendel, pela ajuda imensa em Desenho Técnico e nos trabalhos em grupo.

Ao meu namorado Mateus, que me auxiliou e me acalmou em todos os momentos nesse processo de escrita do trabalho, além de ser extremamente carinhoso e motivador.

Aos amigos das caronas: Rafael e Bruno, colegas de apartamento e agregados, em especial Tassiana, Amanda, Ix, Pedro e Filipe, colegas da UnB, em especial Juliana, Hugo e Débora e colegas da Embrapa CENARGEN. Emília, que me socorreu em todos os momentos que precisei. Aos colegas de trabalho da Intelecto, pelas conversas no ônibus e companhia no almoço e janta.

Ao coral Serenata de Natal, por me proporcionar uma experiência fantástica de felicidade, trabalho voluntário e responsabilidade.

Aos incríveis professores que tive ao longo do curso: Wender, Jez, Fernanda, Ana Cristi, Ângelo, Jeniffer, Allan, Federico, Jorlandio, Gargano e Alexandra.

Aos namorados que tive durante o curso: Bruno, do meu terceiro ano do ensino médio, que me instruiu em todo o período de matrícula, me comprou ficha do RU e me ajudou nos testes de cálculo. Igor, que foi meu companheiro nas matérias, na Serenata de Natal, no Política na Escola e no Laboratório de Materiais e Combustíveis. Paulo, que esteve comigo nos semestres mais pesados e durante um tempo na pandemia.

À minha orientadora de PIBIC Dra. Maria Carolina, com sua paciência e didática no Laboratório de Semioquímicos na Embrapa CENARGEN.

Ao meu orientador Dr. Daví Alexsandro, pela disponibilidade e paciência de me orientar, e por ser um excelente professor.

SUMÁRIO

RESUMO.....	7
ABSTRACT	8
LISTA DE FIGURAS	9
LISTA DE GRÁFICOS.....	10
LISTA DE TABELAS	11
1. INTRODUÇÃO.....	12
1.1. Motivação	14
1.2. Objetivos	14
2. GASES ESTUFA E TÉCNICAS DE CAPTURA.....	15
3. GLICEROL.....	17
4. MODELAGEM MOLECULAR CLÁSSICA.....	21
4.1. Mecânica Molecular.....	21
4.2. Dinâmica Molecular Clássica.....	22
5. METODOLOGIA	23
5.1. Minimização de Energia e Dinâmica Molecular	23
5.2. Modelos e Campos de Força.....	23
5.3. Construção do Modelo	23
6. RESULTADOS E DISCUSSÃO	25
7. CONCLUSÕES.....	29
8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	30

RESUMO

Neste trabalho foi realizado um estudo químico-computacional do potencial do glicerol na captura de CO₂. Utilizando ferramentas da dinâmica molecular clássica, foi possível notar que em um intervalo de 293.15 K – 303.15 K o sistema glicerol-CO₂ apresentou maior viscosidade com temperaturas maiores. Ao mesmo tempo, foi verificado que, mesmo a 303.15 K, o sistema gly-CO₂ apresentava volume inferior ao mesmo sistema a 293.15 K, indicando maior capacidade fisiosortiva do glicerol com o aumento de temperatura no referido intervalo de temperatura.

Palavras-chave: glicerol, CO₂, dinâmica molecular, viscosidade, adsorção.

ABSTRACT

In this work, was carried out a chemical-computational study of the potential of glycerol in CO₂ capture. Using classical molecular dynamics tools, it was possible to notice that in a range of 293.15 K – 303.15 K the gly-CO₂ system showed higher viscosity with higher temperatures. At the same time, it was found that, even at 303.15 K, the gly-CO₂ system had a lower volume than the same system at 293.15 K, indicating greater glycerol physiosorptive capacities with the increase in temperature, in that temperature range.

Keywords: glycerol, CO₂, molecular dynamics, viscosity, adsorption.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Representação do efeito de ilhas de calor.	12
Figura 2. Esquematização do efeito estufa.	15
Figura 3. Fórmula estrutural do glicerol.	17
Figura 4. Exemplificação da reação de transesterificação.	18
Figura 5. Exemplificação da reação de saponificação.....	18
Figura 6. Exemplificação da síntese do glicerol a partir do propeno.	19
Figura 7. Faixa de tempo para observação de alguns fenômenos moleculares.	24
Figura 8. Distribuição das moléculas de CO ₂ em glicerol a 293.15 K e 303.15 K.	27

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1. Volume (mil m ³) de glicerina produzido a partir do biodiesel.	20
Gráfico 2. Comportamento temporal da viscosidade do glicerol em duas condições de temperatura.....	25
Gráfico 3. Comportamento temporal da viscosidade do glicerol antes e depois da captura de CO ₂ a 293.15 K.	26
Gráfico 4. Comportamento temporal da viscosidade do glicerol antes e depois da captura de CO ₂ a 303.15 K.	26
Gráfico 5. Comportamento temporal da viscosidade do glicerol depois da captura de CO ₂ a 293.15 K e 303.15 K.	27

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Propriedades físico-químicas do glicerol.....	17
Tabela 2. Nomenclaturas comerciais para a glicerina. ^{13,15}	20
Tabela 3. Propriedades experimentais e teóricas do glicerol a 293.15K.	25
Tabela 4. Propriedades experimentais e teóricas do glicerol a 303.15K.	25
Tabela 5. Propriedades teoricamente determinadas para o sistema gly-CO ₂ a 293.15 K e 303.15 K.....	28

1. INTRODUÇÃO

A constante procura por padrões de vida mais elevados, levou a humanidade a aumentar de forma vertiginosa sua demanda energética. Com o início do uso de máquinas a vapor durante a revolução industrial, o carvão foi a principal matéria-prima de geração de energia até o século XIX. No século XX o aprimoramento da máquina a vapor possibilitou o desenvolvimento de motores a combustão interna tendo a gasolina e o diesel, derivados do petróleo, como combustíveis; motores elétricos e energia nuclear surgiram posteriormente.¹

O resultado inesperado deste aumento no consumo de combustíveis foi o lançamento de toneladas de CO₂ para a atmosfera nas décadas seguintes. A geração de resíduos gasosos na indústria e por automóveis, que muitas vezes não são tratados de forma adequada, causa poluição nas áreas industriais, afetando a saúde população e colaborando para a intensificação do efeito estufa.²

Outro problema comum em regiões urbanizadas são as ilhas de calor. Em grandes centros, a alta densidade de construções e a baixa densidade de vegetação arbórea faz com que áreas urbanizadas tenham a tendência em ter temperaturas mais altas que nas regiões rurais e periféricas; esse fenômeno é chamado de ilha de calor urbano, exemplificado na Figura 1.³

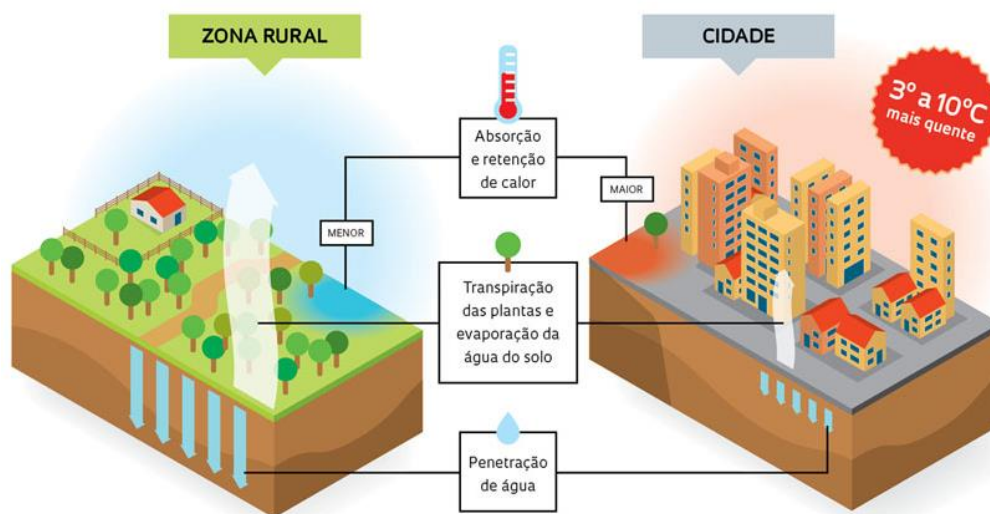


Figura 1. Representação do efeito de ilhas de calor. Fonte: https://revistapesquisa.fapesp.br/wp-content/uploads/2012/10/078-081_Ilhas-de-Calor_200-3.jpg

O termo utilizado para o fenômeno que permite que a Terra tenha uma temperatura habitável se chama efeito estufa: os gases presentes na atmosfera, como CO₂, CH₄, O₃ e vapor de água, formam um “cobertor” e esses gases absorvem parte da radiação emitida pelo sol. Apesar de natural e imprescindível para a vida na Terra, a intensificação da emissão de gases do efeito estufa, principalmente o CO₂, devida à ação antrópica, vem se tornando um problema: o aquecimento global.⁴ Alguns autores, como Molion (2008), defendem que a Terra passa por períodos constantes de mudança de temperatura, ou seja, o aquecimento global é de natureza intrínseca da Terra, não tendo qualquer relação com o período pós-revolução industrial.⁵ No entanto, a concentração antrópica de gases estufa em ambientes urbanos por atividades é inegável.

Independente das ações antrópicas serem um fator ou não para o aquecimento global, vários países firmaram acordos para a diminuição da emissão de gases estufa. O Protocolo de Kyoto (1997) estabeleceu a limitação da emissão dos gases que contribuem para o efeito estufa: metano (CH₄), gás carbônico (CO₂), óxido nitroso (N₂O) e os CFCs, para que houvesse uma redução de 5,2% entre 2008 e 2012.⁶ No Acordo de Paris, em 2015, 195 países se comprometeram a reduzir suas emissões de CO₂ e outros gases estufa para evitar que a temperatura global aumente em 1,4°C.⁷

Paralelo a isso, tecnologias limpas de geração de energia e combustíveis foram sendo empregadas e aprimoradas para a redução da emissão de CO₂: energia eólica, hidráulica e solar, biomassa e geotérmica; além de métodos de captura de CO₂: adsorção, absorção e separação por membrana. Além destes fatores preventivos, faz-se necessário o planejamento de novos dispositivos de capturas. Assim, neste trabalho, apresentaremos uma exploração químico-computacional da aplicabilidade do glicerol (conhecido coproduto de produção de biocombustível) na captura de CO₂.

1.1. Motivação

Poucas informações são disponibilizadas acerca desta propriedade por parte do glicerol. Assim, entende-se que uma exploração inicial acerca deste potencial de captura de CO₂ por parte do glicerol é urgente.

1.2. Objetivos

Caracterizar o potencial de captura de CO₂, por parte do glicerol, em diferentes condições de temperatura.

Esta caracterização será feita através da simulação computacional baseada em Dinâmica Molecular Clássica. Assim, espera-se verificar através de variação de viscosidade o potencial de captura apresentado pelo glicerol.

2. GASES ESTUFA E TÉCNICAS DE CAPTURA

O efeito estufa, como mencionado anteriormente, é um fenômeno natural que ocorre na atmosfera da Terra possibilitando a vida no planeta. Ele ocorre porque parte da radiação solar ao ser absorvida superfície terrestre é liberada na forma de radiação no infravermelho, calor, e parte dessa radiação, ao interagir com os gases do efeito estufa na atmosfera é refletida de volta à superfície terrestre (Figura 2). Diversos gases são responsáveis pelo efeito estufa, dentre eles estão o metano, o gás carbônico, o óxido nitroso, o ozônio, e, principalmente o vapor de água.⁸

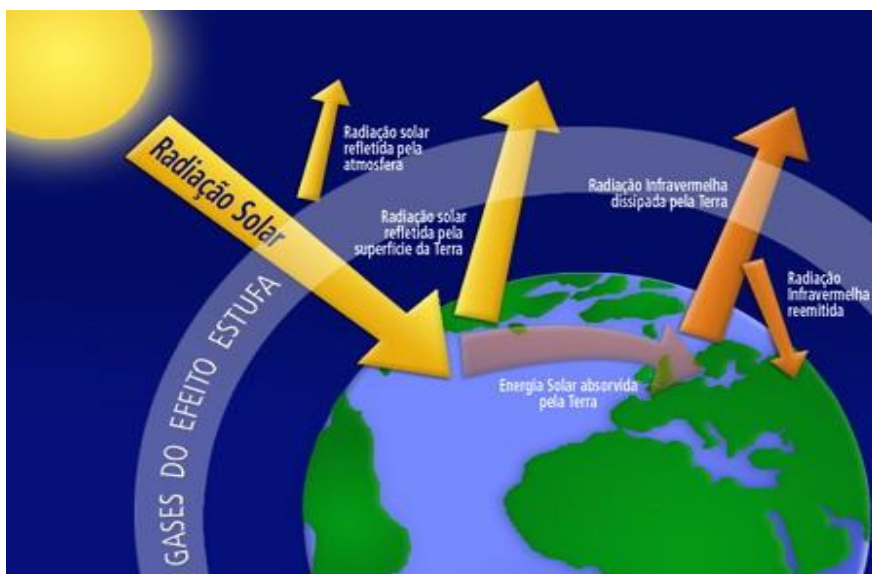


Figura 2. Esquemática do efeito estufa. Fonte: <https://blogdoenem.com.br/efeito-estufa-geografia-enem/>

A intensificação da quantidade dos gases poluentes é uma preocupação mundial, pois além do aquecimento global, esse excesso de gases pode causar danos à saúde: problemas respiratórios e cardiovasculares.⁹ Então, atualmente há vários processos que visam a captura dos gases advindos de processos industriais, que pode ser feita por métodos: separação por membrana, absorção ou adsorção.¹⁰

O método de separação de gases por membrana consiste na diferença de potencial químico. Há quatro tipos de membranas que podem ser utilizadas: inorgânica, líquido iônico, polimérica e de transporte facilitado. A escolha do tipo de membrana depende das condições do processo e da composição do gás de alimentação.¹¹

A absorção consiste em capturar gás por um solvente, e há dois tipos: a absorção física e a química. Na absorção física, utiliza-se um equilíbrio gás-líquido, que pode ser descrito pela lei de Henry, para dissolver o gás em um solvente, geralmente aminas. A absorção química consiste na captura do gás em um solvente como o produto de uma reação química para depois ser separado ao deslocar-se o equilíbrio da reação no sentido reverso, geralmente pela aplicação de calor fazendo com que seja necessário bastante energia.¹⁰

Outro método de captura é a adsorção, um fenômeno de superfície, que consiste em adsorver o gás em uma superfície porosa sólida. Esse adsorvente pode ser físico ou químico. Os adsorventes químicos são seletivos e seu princípio é estabelecer uma ligação química entre o adsorvente e o adsorbato, logo, é um processo irreversível. A taxa de adsorção é lenta pois depende de uma energia de ativação, conseqüentemente possui um alto calor de adsorção; um exemplo de adsorvente químico é a sílica mesoporosa com aminas. Ao contrário, nos adsorventes físicos, o processo tem taxa de adsorção alta, logo, menor calor de adsorção e são reversíveis; por outro lado, não são seletivos. Exemplos mais comuns são zeólitas e carvão ativado.¹⁰

3. GLICEROL

O glicerol (propano-1,2,3-triol) é um líquido (a temperatura ambiente) transparente, altamente higroscópico, solúvel em água, polar, viscoso e tem gosto adocicado; sua fórmula molecular é $C_3H_8O_3$ e possui três grupos álcool (-OH) em sua estrutura (Figura 3). Foi descoberto por Carl W. Scheele em 1779 reagindo óleo de oliva com óxido de chumbo (PbO).^{12,13} Algumas propriedades físico-químicas do glicerol são apresentadas na Tabela 1.

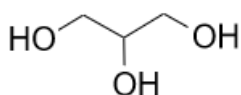


Figura 3. Fórmula estrutural do glicerol.

Tabela 1. Propriedades físico-químicas do glicerol.

Propriedade físico-química	Valor
Calor de combustão padrão ($\Delta_c H^\circ$)	1655,4 kJ.mol ⁻¹
Capacidade calorífica molar do líquido a 25°C (C_p)	218,9 J/mol.K
Condutividade térmica a 25°C	0,285 W/m
Constante de dissociação de ácidos e bases orgânicas a 25°C (pKa)	14,15
Entalpia de formação do gás ($\Delta_f H^\circ$)	-577,9 kJ.mol ⁻¹
Entalpia de formação do líquido ($\Delta_f H^\circ$)	-669,6 kJ.mol ⁻¹
Entalpia de vaporização na temperatura de ebulição ($\Delta_{vap} H T_b$)	61 kJ.mol ⁻¹
Entalpia molar de fusão ($\Delta_{fus} H$)	18,3 kJ.mol ⁻¹
Entropia molar padrão a 25°C (S°)	206,3 J/mol.K
Massa molar	92,09 g.mol ⁻¹
Pressão crítica (P_c)	7,5 MPa
Temperatura crítica (T_c)	850 K
Temperatura de fusão (T_m)	291 K
Temperatura de ebulição (T_b)	563 K
Viscosidade a 25°C (ρ)	934 mPa

Fonte: Handbook of Chemistry and Physics David R. Lide, 2007.¹⁴

Na natureza o glicerol não é encontrado de forma livre, e sim como triacilglicerídeos: ésteres presentes em óleos e gorduras de animais e plantas. Sua forma livre é obtida tanto através da transesterificação (Figura 4) quanto da saponificação (Figura 5) desses triacilglicerídeos. Também pode ser produzido sinteticamente a partir do propeno, extraído de combustíveis fósseis (Figura 6). Outras formas, porém, menos comuns, de se obter o glicerol são a hidrogenação de carboidratos e fermentação de álcoois alílicos.^{12,13}

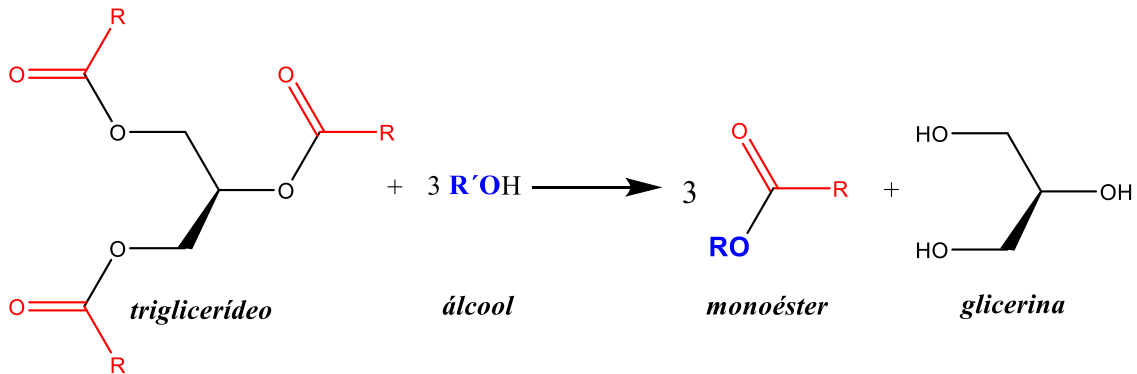


Figura 4. Exemplificação da reação de transesterificação.

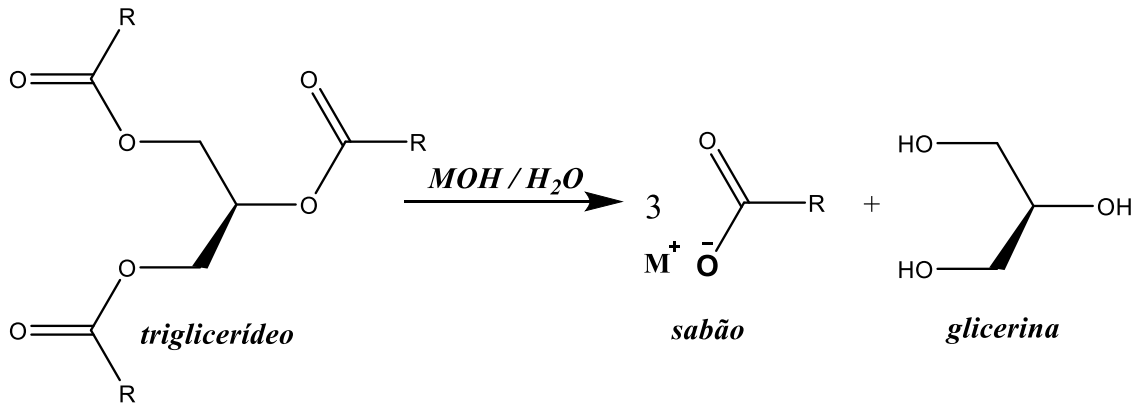


Figura 5. Exemplificação da reação de saponificação.

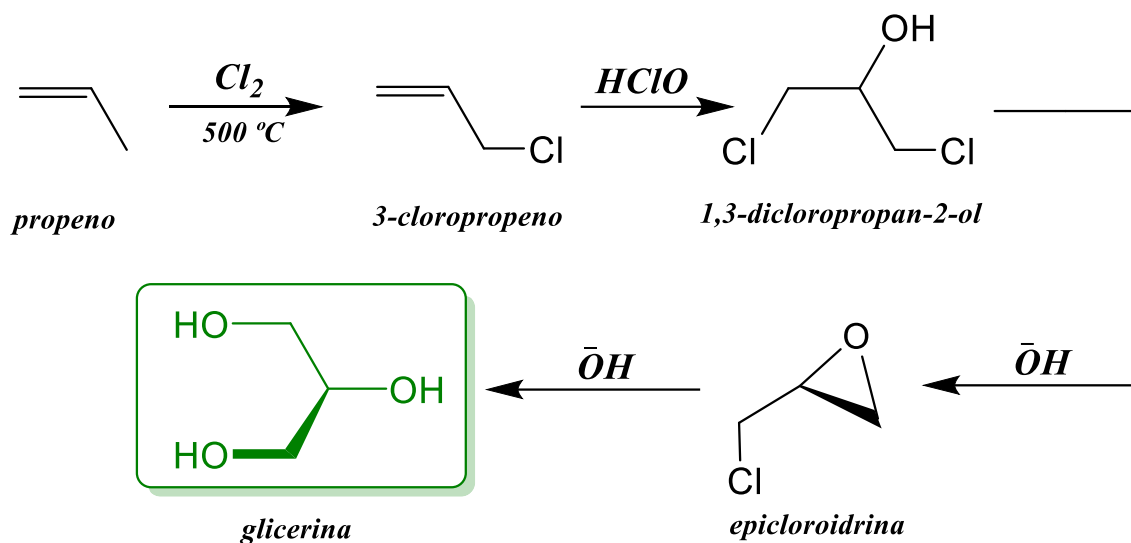


Figura 6. Exemplificação da síntese do glicerol a partir do propeno.

O glicerol, que previamente era produzido a partir do propeno, derivado de combustíveis fósseis, passou a ser obtido a partir de óleos e gorduras devido ao aumento da produção de biocombustíveis. A reação de transesterificação de óleos e gorduras de plantas e animais na presença de metanol ou etanol gera o biodiesel como produto principal e o glicerol como subproduto, sendo que cerca de 10% dos produtos obtidos na transesterificação equivalem ao glicerol. Assim, a maior parte da produção de glicerol está atrelada a obtenção do biodiesel.¹³

os últimos 10 anos, segundo a ANP, a principal matéria-prima da obtenção de biodiesel (B100) foi o óleo de soja, de 68% a 83% da produção total. Em 2019 foram gerados 494,6 mil m³ de glicerina através das matérias-primas (Figura 7). A região que mais gerou glicerol foi o Centro-Oeste, 40,6%; no estado do Mato Grosso, cerca de 22,8% da produção total do ano.¹⁶



Gráfico 1. Volume (mil m³) de glicerina produzido a partir do biodiesel. Fonte: Anuário Estatístico Brasileiro do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, 2020. Tabela 4.12. ¹⁶

Comercialmente o glicerol é referido como glicerina (Tabela 2) e possui uma gama de aplicações nas mais variadas indústrias: na indústria farmacêutica é utilizado como solvente e umectante, tendo produtos como pomadas, cápsulas e supositórios. Comidas e bebidas também possuem glicerina, que pode ter função de adoçante, umectante, conservante e anticongelante. Por suas propriedades umectantes e emolientes, também é utilizada na área de cosméticos em maquiagens e cremes hidratantes. Outro emprego bem conhecido da glicerina é a reação com ácido nítrico, gerando o explosivo nitroglicerina, utilizado em construções civis para demolição.^{12,13,17}

Tabela 2. Nomenclaturas comerciais para a glicerina.^{13,15}

Nome	Composição	Aplicação
Glicerina loira	80% de glicerol, além de metanol, água e sais dissolvidos	Construção civil, nutrição animal e defensivos agrícolas
Glicerina purificada (grau USP), bidestilada	>95% de glicerol	Cosméticos, indústria farmacêutica, alimentos, higiene pessoal, explosivos, lubrificantes, tabaco e vernizes.

4. MODELAGEM MOLECULAR CLÁSSICA

4.1. Mecânica Molecular

A mecânica molecular (MM) é um dos métodos clássicos utilizados para a modelagem computacional de sistemas contendo números elevados de átomos e/ou moléculas. Neste método, os átomos são considerados como esferas rígidas, de massas fixas (cuja magnitude depende do átomo a ser representado), cujas ligações são descritas a partir de movimento harmônico. Nesta perspectiva, este método não é aplicável à sistemas dissociáveis.¹⁸

Assim, a determinação de propriedades energéticas de um dado sistema dependerá de como estas entidades atômicas e/ou moleculares se comportam à medida que distâncias e ângulos sofrem oscilações. Ou seja, a MM procura mostrar qual arranjo espacial apresenta menor energia, de acordo com a soma (equação 4) de um conjunto de funções de energia potencial (U) denominado campo de força empírico. Assim, os termos descritos pelo campo de força são energia de estiramento (U_{est}), energia de deformação angular (U_{ang}), energia de torção (U_{died}), energia de deformação fora do plano (U_{dfp}), interações do tipo van der Waals (U_{vdw}), potencial eletrostático (U_{eletro}) e os termos cruzados (U_{cruz}).^{18,19}

$$U = U_{est} + U_{ang} + U_{died} + U_{dfp} + U_{vdw} + U_{eletro} + U_{cruz} \quad (1)$$

4.2. Dinâmica Molecular Clássica

Assim como a mecânica molecular, a dinâmica molecular é um método clássico teórico de modelagem de moléculas que utiliza forças newtonianas para simular como as moléculas se comportam, mas, desta vez, dinamicamente, integrando a segunda lei de Newton (Equação 2).²⁰

$$\mathbf{F}(t) = m \cdot \mathbf{a} \quad (2).$$

Sendo $\mathbf{F}(t)$ a força atuante em cada partícula em função do tempo, m a massa e \mathbf{a} a aceleração da partícula, que também é a primeira derivada da velocidade e a segunda derivada da posição e, a partir disso, pode-se obter as energias cinética e potencial do sistema.²¹

A descrição da dinâmica de partículas e sua transposição aos fenômenos moleculares ocorre em função da ideia de que a força também pode ser descrita como um gradiente de um potencial (Equação 3), tal que

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i U \quad (3).$$

Assim, também é possível assumir que

$$-\frac{dU_i}{dr_i} = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (4).$$

Onde U_i e m_i são, respectivamente o i -ésimo termo energético verificado para o corpo de massa m que se relaciona com tal energia.

Ou seja, é possível verificar os estados energéticos assumidos por cada configuração molecular em função do tempo e das forças que atuam sobre ela.

No próximo capítulo, apresentaremos a metodologia aplicada para a realização deste trabalho.

5. METODOLOGIA

5.1. Minimização de Energia e Dinâmica Molecular

Para a realização deste estudo, todos os sistemas passaram por prévia minimização de energia pela aplicação do algoritmo integrador Steepest Descent, e um tempo de simulação de 5 ns, distribuídos em 500000 passos com tempo integração de 0.01 ps.

Em seguida, foram realizados cálculos de dinâmica molecular com o ensemble NPT (número de partículas, pressão e temperatura constantes) através de algoritmo integrador md. O intervalo de simulação foi de 500 ps distribuídos em 500000 passos, cujo tempo de integração foi de 0.001 ps.

Em todas as simulações de sistemas puros (glicerol e CO₂), contaram com constituídos de 600 moléculas de gly e 30 moléculas de CO₂; as soluções estudadas apresentam 630 moléculas ao todo (600 de glicerol e 30 de CO₂) exploradas em condições de 293.15 K e 303.15 K ambas a 1 bar de pressão. Todas as simulações foram realizadas utilizando o pacote GROMACS.²²⁻²⁸

5.2. Modelos e Campos de Força

Para as simulações, foi aplicado o campo de força OPLS-AA (do inglês *Optimized Potentials for Liquid Simulations all atoms*). Para estas simulações, foram geradas topologias através da ferramenta LigParGen.

5.3. Construção do Modelo

Os sistemas aqui estudados tiveram suas caixas periódicas geradas através do protocolo previamente implementado no pacote packmol.^{29,30} Todas as caixas apresentam estrutura cúbica de aresta 4.3 nm. Na Figura 7 é exposto um exemplo de configuração inicial para a solução gly-CO₂.

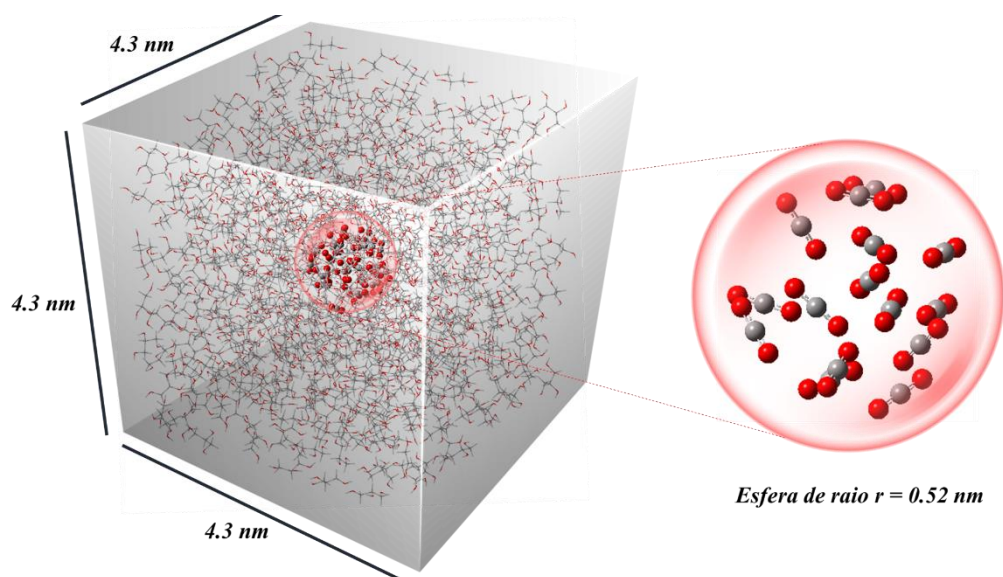


Figura 7. Faixa de tempo para observação de alguns fenômenos moleculares.

6. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente, foram verificadas na literatura as propriedades viscosidade e densidade para o glicerol e posteriormente essas mesmas propriedades foram modeladas utilizando os protocolos de dinâmica molecular previamente apresentados. Esses dados são apresentados na tabela 3 e 4 e no gráfico 2.

Tabela 3. Propriedades experimentais e teóricas do glicerol a 293.15K.

Propriedade	Experimental ³¹	Teórico	Erro relativo
Densidade (g.mL ⁻¹)	1.261	1.206	4.362%
Viscosidade (cP)	1410	1039.91	26.25%

Tabela 4. Propriedades experimentais e teóricas do glicerol a 303.15K.

Propriedade	Experimental ³¹	Teórico	Erro relativo
Densidade (g.mL ⁻¹)	1.254	1.201	4.226%
Viscosidade (cP)	612	872	42.48%

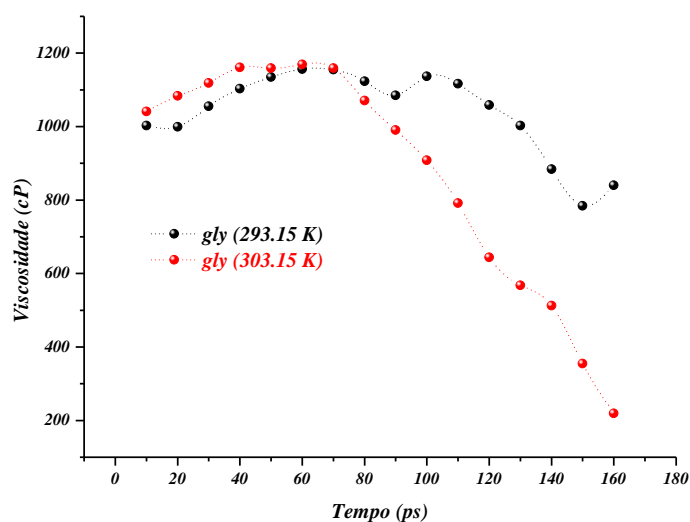


Gráfico 2. Comportamento temporal da viscosidade do glicerol em duas condições de temperatura.

Estes dados indicam que a tendência experimentalmente observada é repetida em escala teórica; embora não apresentem valores idênticos para a viscosidade, o comportamento geral do modelo pode ser usado para verificar qualitativamente o comportamento do glicerol como agente de sequestro de CO₂.

A partir deste ponto, foram calculadas as viscosidades do sistema antes e depois da captura do CO₂. Os dados foram compilados nos gráficos 3 e 4.

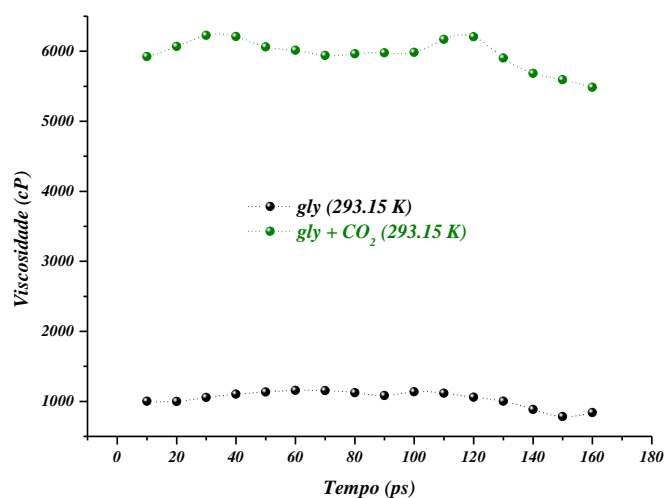


Gráfico 3. Comportamento temporal da viscosidade do glicerol antes e depois da captura de CO₂ a 293.15 K.

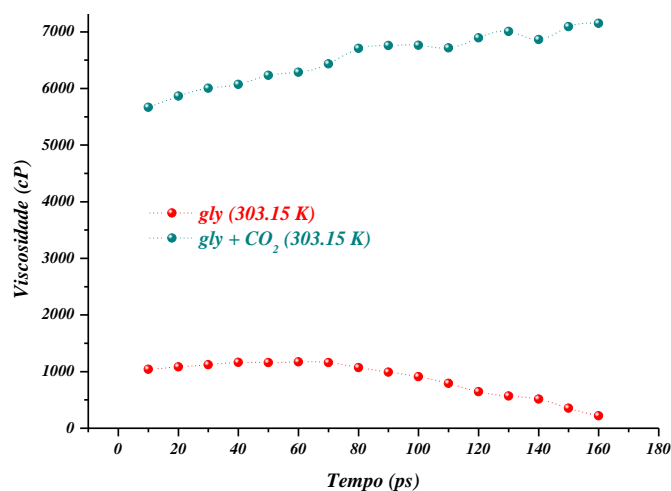


Gráfico 4. Comportamento temporal da viscosidade do glicerol antes e depois da captura de CO₂ a 303.15 K.

Como é possível verificar nos Gráficos 3 e 4, a viscosidade do glicerol aumenta à medida que o CO₂ é dissolvido no mesmo. Ao mesmo tempo, percebe-se que a capacidade de captura de CO₂ por parte do glicerol aumenta

com o aumento de temperatura no intervalo 293.15 K - 303.15 K. Esta observação é mais evidente no Gráfico 5.

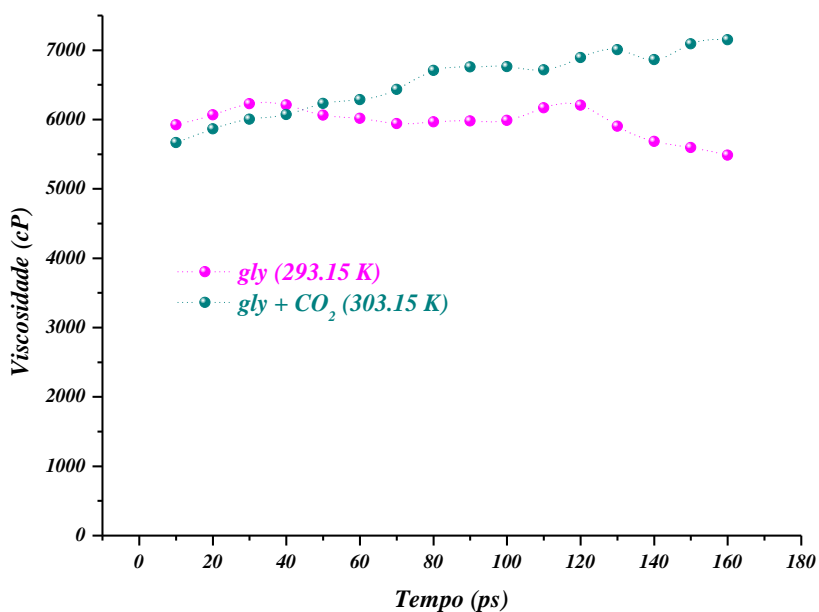


Gráfico 3. Comportamento temporal da viscosidade do glicerol depois da captura de CO₂ a 293.15 K e 303.15 K.

Embora haja esta relação, em ambos os casos, as moléculas de CO₂ tendem à uma distribuição periférica (Figura 8).

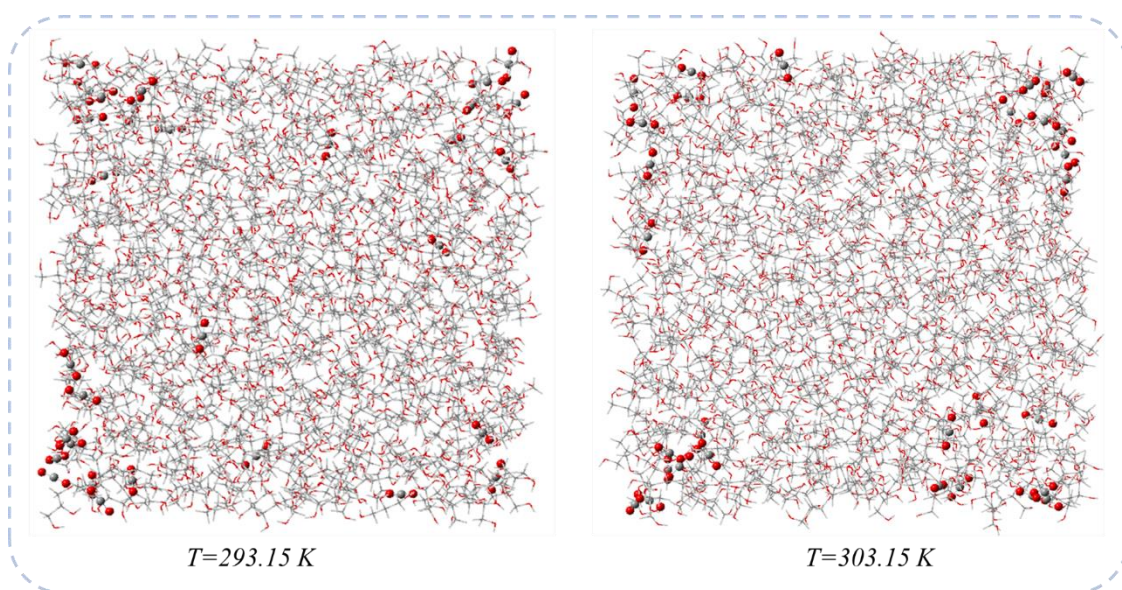


Figura 8. Distribuição das moléculas de CO₂ em glicerol a 293.15 K e 303.15 K.

Em parte, tal comportamento se deve a polaridade do sistema solvente (polar) em relação ao CO₂ (não polar). Assim, como as interações entre as moléculas de glicerol são predominantemente ligação de hidrogênio, estas entidades tendem a assumir um estado de aglomeração mais efetivo, quando comparado ao estado de interação com as moléculas de CO₂.

As propriedades densidade e viscosidade também foram determinadas para os sistemas pós-captura de CO₂ (Tabela 5).

Tabela 5. Propriedades teoricamente determinadas para o sistema gly-CO₂ a 293.15 K e 303.15 K.

Propriedade	293.15 K	303.15 K
Densidade (g.mL⁻¹)	1.095	1.113
Viscosidade (cP)	5963.760	6531.850
V_{gly-co2} (nm³)	86.530	85.191
V_{co2} (nm³)*	121.220	122.150
V_{gly} (nm³)*	76.180	76.450

**Medida de volume das espécies puras.*

Estes dados indicam que a viscosidade média do sistema aumenta com a temperatura, para o sistema gly-CO₂. Além disto, neste intervalo de temperatura, há uma contração volumétrica do sistema com o aumento de temperatura. Assim, com o aumento da viscosidade do sistema, contração volumétrica do sistema gly-CO₂, é possível inferir que houve maior solubilidade do CO₂ com o aumento de temperatura no intervalo 293.15 K – 303.15 K.

7. CONCLUSÕES

O glicerol apresenta potencial capacidade de captura de CO₂ na faixa de temperatura 293.15 K – 303.15 K. Ao mesmo tempo, esta capacidade pode ser acompanhada pelo aumento da viscosidade do sistema.

Para que haja uma maior garantia destes resultados, análises com maior faixa de temperatura e pressão precisam ser realizadas.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Goldemberg, J. & Lucon, O. Energias Renováveis: Um Futuro Sustentável. *Rev. USP* 6–15 (2007).
2. Da Silva, A. F. & Vieira, C. A. Aspectos da Poluição Atmosférica: Uma Reflexão Sobre a Qualidade do Ar nas Cidades Brasileiras. *Ciência e Sustentabilidade* **3**, 166–189 (2017).
3. Amorim, M. C. de C. T., Dubreuil, V., Quenol, H. & Neto, J. L. S. Características das Ilhas de Calor em Cidades de Porte Médio: Exemplos de Presidente Prudente (Brasil) e Rennes (França). **7**, (2009).
4. Houghton, J. *Global Warming*. (Cambridge University Press, 2004).
5. Molion, L. C. B. Aquecimento Global: Uma Visão Crítica. *Rev. Bras. Climatol.* **3**, 7–24 (2008).
6. Silva, D. H. da. Protocolos de Montreal e Kyoto: Pontos em Comum e Diferenças Fundamentais. *Rev. Bras. Política Int.* **52**, 155–172 (2009).
7. Anderson, T. R., Hawkins, E. & Jones, P. D. CO₂, The Greenhouse Effect and Global Warming: From the Pioneering Work of Arrhenius and Callendar to today's Earth System Models. *Endeavour* **40**, 178–187 (2016).
8. Silva, R. W. da C. & Paula, B. L. de. Causa do Aquecimento global: Antropogênica versus Natural. *Terrae Didat.* **5(1)**, 42–49 (2015).
9. Dapper, S. N., Spohr, C. & Zanini, R. R. Poluição do Ar como Fator de Risco Para a Saúde: Uma Revisão Sistemática no Estado de São Paulo. *Estud. Avancados* **30**, 83–97 (2016).
10. Nakao, S., Yogo, K., Goto, K., Kai, T. & Yamada, H. *Advanced CO₂ Capture Technologies: Absorption, Adsorption, and Membrane Separation Methods*. (Springer International Publishing, 2019). doi:<https://doi.org/10.1007/978-3-030-18858-0> ©.
11. Papadopoulos, A. I. & Seferlis, P. *Process Systems and Materials for*

- CO2 Capture. Process Systems and Materials for CO 2 Capture* (2017). doi:10.1002/9781119106418.
12. CHRISTOPH, R., SCHMIDT, B., STEINBERNER, U., DILLA, W. & KARINEN, R. Glycerol. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry* 67–81 (1998) doi:10.1002/14356007.a12.
 13. Mota, C. J. A., Pinto, B. P. & Industry, C. *Glycerol: A Versatile Renewable Feedstock for the Chemical Industry*. (Springer International Publishing, 2017). doi:10.1007/978-3-319-59375-3.
 14. Lide, D. R., Baysinger, G. & Berger, L. I. *Handbook of Chemistry and Physics. CRC Handbook of Chemistry and Physics* (2007).
 15. Mota, C. J. C., Silva, C. X. A. da & Gonçalves, V. L. C. Gliceroquímica: Novos Produtos e Processos a Partir da Glicerina de Produção de Biodiesel. *Quim. Nova* **32**, 639–648 (2009).
 16. *Anuário Estatístico Brasileiro Do Petróleo, Gás Natural E Biocombustíveis. Agência Nacional Do Petróleo, Gás Natural E Biocombustíveis* http://www.anp.gov.br/images/publicacoes/anuario-estatistico/2018/anuario_2018.pdf (2020).
 17. Tudo Sobre a Glicerina. <https://gotaquimica.com.br/noticias/tudo-sobre-glicerina/>.
 18. Coelho, L. W., Junqueira, G. M. A., Herrera, J. O. M., Machado, S. de P. & Machado, B. da C. Aplicação de Mecânica Molecular em Química Inorgânica. **22**, 396–404 (1999).
 19. Turrell, G. Mathematics for Chemistry and Physics. in 215–243 (2002).
 20. Pathria, R. K. & Beale, P. D. *Statistical Mechanics*. vol. 53 (Elsevier Inc., 2011).
 21. Namba, A. M., Da Silva, V. B. & Da Silva, C. H. T. P. Dinâmica molecular: Teoria e Aplicações em Planejamento de Fármacos. *Eclet. Quim.* **33**, 13–24 (2008).
 22. Berendsen, H. J. C., Spoel, D. va. der & Drunen, R. va. GROMACS: A

- Message-passing Parallel Molecular Dynamics Implementation. in *Computer Physics Communications* 43–56 (1995).
23. Lindahl, E., Hess, B. & Spoel, D. van der. GROMACS 3.0: A Package for Molecular Simulation and Trajectory Analysis. in *Molecular modeling annual* 306–317 (2001).
 24. Spoel, D. Van Der *et al.* GROMACS: Fast, Flexible, and Free. *J. Comput. Chem.* **26**, 1701–1718 (2005).
 25. Hess, B., Kutzner, C., Spoel, D. van der & Lindahl, E. GROMACS 4: Algorithms for Highly Efficient, Load-Balanced, and Scalable Molecular Simulation. *Journal Chem. Theory Comput.* **4**, 435–447 (2008).
 26. Pronk, S. *et al.* GROMACS 4.5: A High-throughput and Highly Parallel Open Source Molecular Simulation Toolkit. *Bioinformatics* **29**, 845–854 (2013).
 27. Páll, S., Abraham, M. J., Kutzner, C., Hess, B. & Lindahl, E. Tackling Exascale Software Challenges in Molecular Dynamics Simulations with GROMACS. in *EASC 2014: Solving Software Challenges for Exascale* 3–27 (2014).
 28. James Abraham, M. *et al.* GROMACS: High Performance Molecular Simulations Through Multi-level Parallelism From Laptops to Supercomputers. *SoftwareX* **1–2**, 19–25 (2015).
 29. Martínez, J. M. & Martínez, L. Packing Optimization for Automated Generation of Complex System's Initial Configurations for Molecular Dynamics and Docking. *J. Comput. Chem.* **24(7)**, 819–825 (2003).
 30. Martínez, L., Andrade, R., Birgin, E. G. & Martínez, J. M. Packmol: A Package for Building Initial Configurations for Molecular Dynamics Simulations. *J. Comput. Chem.* **30(13)**, 2157–2164 (2009).
 31. Glycerine Producers' Association. *Physical Properties of Glycerine and Its Solutions.* (1963).