

## 14º Congresso de Inovação, Ciência e Tecnologia do IFSP - 2023

### Avanços em membranas de carbono e estruturas porosas de grafeno para eficiência na separação de gases e mitigação do efeito estufa

SABRINA SILVA SANTOS<sup>1</sup>, WHISNER FRAGA MAMEDE<sup>2</sup>, CAETANO RODRIGUES MIRANDA<sup>3</sup>, DANIELA ANDRADE DAMASCENO<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Estudante do Curso Técnico em Logística Integrado ao Ensino Médio, Bolsista CNPq, IFSP, Campus Pirituba, [sabrina.silva1@aluno.ifsp.edu.br](mailto:sabrina.silva1@aluno.ifsp.edu.br).

<sup>2</sup> Professor área de Mecânica, IFSP, Campus Pirituba, [whisner@ifsp.edu.br](mailto:whisner@ifsp.edu.br).

<sup>3</sup> Professor área de Física, USP, [ermiranda@usp.br](mailto:ermiranda@usp.br).

<sup>4</sup> Pós-Doutoranda em Mecânica, USP, [danielaandrade980@gmail.com](mailto:danielaandrade980@gmail.com).

Área de conhecimento (Tabela CNPq): 1.05.07.00-6 Física da Matéria Condensada.

**RESUMO:** O efeito estufa é um fenômeno natural causado pela concentração de gases na atmosfera, os quais impactam diretamente as mudanças climáticas. Com o avanço e a ascensão da nanotecnologia, as estruturas porosas do grafeno e os nanotubos de carbono podem ter um impacto direto nesse aspecto, visando a redução dos impactos do gás carbônico na atmosfera. Nesse contexto, este trabalho visa, do ponto de vista teórico, compreender a nível molecular o grafeno e os nanotubos de carbono e, de maneira computacional, utilizando o VMD (Visual Molecular Dynamics), com o objetivo de visualizar sistemas apresentados no trabalho.

**PALAVRAS-CHAVE:** Nanotubos; VMD; Aquecimento global; Nanotecnologia.

### Advancements in carbon membranes and porous graphene structures for enhanced gas separation efficiency and greenhouse gas mitigation.

**ABSTRACT:** The greenhouse effect is a natural phenomenon caused by the concentration of gases in the atmosphere, which directly impact climate change. With the advancement and rise of nanotechnology, the porous structures of graphene and carbon nanotubes can have a direct impact on this aspect, aiming to reduce the effects of carbon dioxide in the atmosphere. In this context, this work aims, from a theoretical perspective, to understand graphene and carbon nanotubes at the molecular level and, computationally, using VMD (Visual Molecular Dynamics), with the goal of visualizing systems presented in the paper.

**KEYWORDS:** Nanotubes; VMD; Global warming; Nanotechnology.

## INTRODUÇÃO

O efeito estufa é ocasionado pela concentração de gases, os quais formam uma camada que permite a passagem dos raios solares e a absorção de calor (Magalhães, *[s.d.]*). Esse processo é responsável por manter a Terra na temperatura adequada para os seres vivos. No entanto, nos últimos anos, a concentração de gases de efeito estufa (principalmente dióxido de carbono, CO<sub>2</sub>) dentro da atmosfera aumentou significativamente, contribuindo de maneira drástica para o aquecimento global e às mudanças climáticas. Diversos métodos e processos têm sido desenvolvidos para separar os gases do efeito estufa da atmosfera, visando mitigar os impactos das mudanças climáticas. Dentre esses

processos, os mais comuns são: destilação, separação criogênica, adsorção, absorção e separação por membrana (Hamm, 2018, p. 28).

A nanotecnologia atua no desenvolvimento de novos materiais, produtos e processos, a partir da capacidade de ver e manipular átomos e moléculas, com o objetivo de criar estruturas que sejam estáveis e com propriedades melhoradas. Um dos ramos mais promissores nesse contexto é o estudo molecular direcionado, que busca manipular e controlar as propriedades de nanomateriais para otimizar suas características e aplicabilidades.

Nesse sentido, a estrutura porosa do grafeno e os nanotubos de carbono têm ganhado destaque como materiais versáteis e eficientes em diversas aplicações, como separações seletivas, purificação de água e sistemas de armazenamento e conversão de energia. Nesta pesquisa iremos destacar influência da nanotecnologia visando a separação de gases através das estruturas porosas de grafeno e nanotubos de carbono (NCs), que têm sido amplamente estudadas devido às suas propriedades físicas e mecânicas, bem como ao seu potencial no avanço das membranas de matriz mista em termos de seletividade e permeabilidade (Eiras e Koros et. al., 2012, p. 1).

## **MATERIAL E MÉTODOS:**

As membranas à base de carbono que têm sido amplamente utilizadas incluem (Hamm, 2018, p. 38) o grafeno e os nanotubos de carbono. O grafeno é um material que vem entrando em ascensão no mundo da ciência e tecnologia devido a suas excelentes propriedades mecânicas e físicas. O grafeno é composto somente por átomos de carbono dispostos como um mosaico hexagonal regular com uma camada de espessura (Hamm, 2018, p. 37-38). Quando produzido com alta qualidade pode ser muito forte, leve, quase transparente, um excelente condutor de calor e eletricidade. Apesar de sua estrutura extremamente fina, o grafeno é até 100 vezes mais forte que o aço (PCC, 2022). É um dos materiais mais fortes já encontrados, além de um material base para formação dos fulerenos, nanotubos ou grafite (PUC Goiás, 2017).

A estrutura porosa do grafeno é de grande relevância devido às suas propriedades únicas e às possíveis aplicações em diversas áreas da ciência e da tecnologia. Os poros podem ser entendidos como espaços vazios ou aberturas em sua estrutura bidimensional de átomos de carbono arranjados hexagonalmente. Estes, podem variar em tamanho, forma e distribuição, e sua introdução pode alterar significativamente as propriedades do material. Os nanotubos de carbono (NCs) também são promissores para o desenvolvimento de tecnologias de membranas para separação de gases de efeito estufa. Os NCs foram sintetizados pela primeira vez em 1991 por Iijima, usando o processo de pirólise de grafite em plasma sob atmosfera controlada de hélio (Herbst, M. et al, 2004, p. 986). Eles são formados por arranjos hexagonais de carbono que originam pequenos cilindros. Usualmente, possuem uma faixa de diâmetro de poucos angstroms a dezenas de nanômetros e podem ter comprimento acima de vários centímetros. Do ponto de vista estrutural, os nanotubos de carbono recebem o nome de acordo com a quiralidade, que pode ser: armchair, zigzag ou chiral. Termos que estão relacionados ao ângulo de enrolamento da folha de grafeno. Eles também podem ser formados por uma parede simples ou múltiplas paredes (Herbst et al., 2004, p. 986).

Ao longo do trabalho, utilizamos o VMD (Visual Molecular Dynamics), um programa computacional para a visualização de sistemas moleculares. Por meio de suas imagens em 3D, o VMD proporciona uma compreensão mais aprofundada dos sistemas estudados, permitindo a visualização do comportamento molecular de cada elemento. A Figura 1 apresenta a interface inicial do programa.

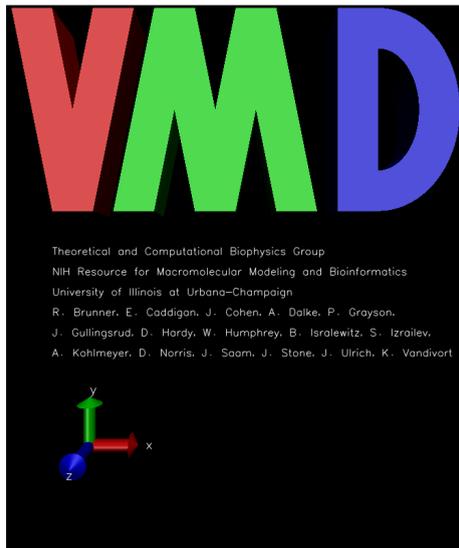


Figura 1: Interface inicial do VMD (Fonte: elaborado pelo autor, 2023).

As figuras 2 e 3 mostram um nanotubo de carbono de parede simples e uma folha de grafeno gerado e visualizado no VMD.

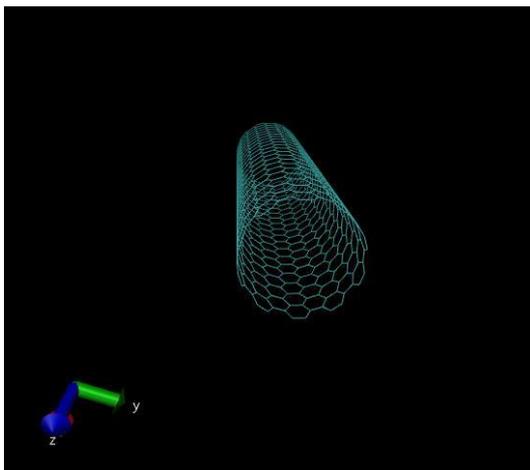


Figura 2 - Estrutura Nanotubo de carbono.

(Fonte: elaborado pelo autor, 2023).

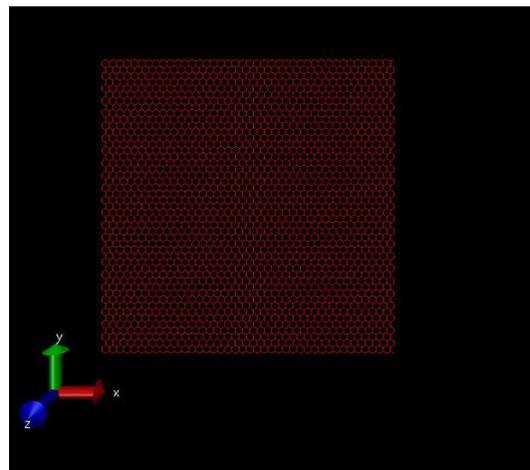


Figura 3 - Estrutura do grafeno..

(Fonte: elaborado pelo autor, 2023).

A Figura 4 apresenta a visualização da estrutura porosa do grafeno e a Figura 5, em mesmo contexto, apresenta o grafeno sendo utilizado na separação de gases. O tamanho do poro irá permitir a passagem de algumas moléculas, mas não de outras.

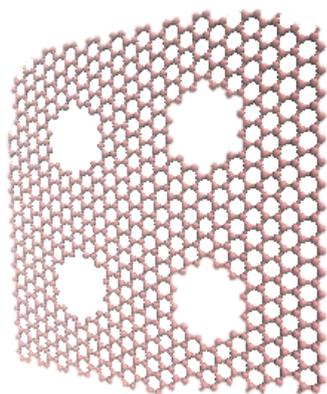


Figura 4 - Grafeno com nanoporos.

(Fonte: elaborado pelo autor, 2023).

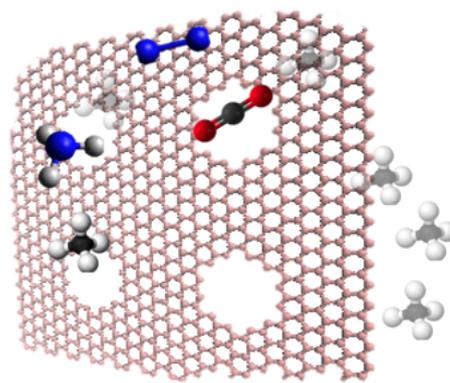


Figura 5 - Grafeno utilizado na separação de gases.

(Fonte: elaborado pelo autor, 2023).

As imagens acima foram utilizadas no processo de imersão e estudo dos sistemas visualizados, com o fim de compreender sua estrutura.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

De maneira geral, folhas de grafeno com porosidades geralmente são mais fracas e menos dúcteis. A resposta mecânica do grafeno nanoporoso não segue o tamanho do poro, em vez disso, ela possui uma relação complexa com o tamanho do poro e a disposição atômica da borda do mesmo (Damasceno et al., 2020, p. 3387-3404). Em análise, alguns dos aspectos relevantes da estrutura do grafeno com poros incluíram seu controle de propriedades, aplicação em filtração, separação e armazenamento de energia. No entanto, é importante notar que a introdução de poros também pode afetar a integridade mecânica do material, tornando-o mais frágil (Damasceno et al., 2020, p. 3387-3404). Portanto, o design e o controle dos poros são cruciais para garantir que as propriedades desejadas sejam obtidas sem comprometer a funcionalidade geral do grafeno poroso. Os nanotubos de carbono também são promissores na filtragem e purificação de gases, funcionando como nanocanais. Pudemos observar também que sua relevância se deve à afinidade com os gases, podendo favorecer propriedades de transporte e permeabilidade, assim contribuindo para a separação de gases e avanços nas tecnologias de membranas.

## CONCLUSÕES

Foi possível compreender como a nanotecnologia pode contribuir para a mitigação das mudanças climáticas por meio do desenvolvimento de tecnologias de membranas para a separação de gases de efeito estufa. Além disso, o estudo abordou a crescente relevância dos nanomateriais, que já são utilizados por diversas indústrias em todo o mundo. A visualização das nanoestruturas através do VMD facilitou a compreensão do mecanismo de filtração dos gases através dos poros do grafeno, bem como dos nanotubos.

## CONTRIBUIÇÕES DOS AUTORES

C.R.M.: Análise de dados, discussão dos resultados e revisão. D.A.D.: Discussão dos resultados, coleta de dados e revisão. S.S.S.: Elaboração do manuscrito, redação, coleta de dados, produção das imagens, análise e discussão dos resultados. W.F.M: Discussão dos resultados e revisão. Todos os autores contribuíram com a revisão do trabalho e aprovaram a versão submetida.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço aos orientadores Caetano Rodrigues Miranda, Whisner Fraga Mamede e Daniela Andrade Damasceno, bem como ao IFUSP (Instituto de Física da USP), ao IFSP (Instituto Federal de São Paulo campus Pirituba), e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

## REFERÊNCIAS

Damasceno, D.A., Rajapakse, R.K.N.D., Mesquita, E. *et al.* Atomistic simulation of tensile strength properties of graphene with complex vacancy and topological defects. *Acta Mech* **231**, 3387–3404 (2020). <https://doi.org/10.1007/s00707-020-02715-6>

EIRAS e Koros et. al. Membranas de Matriz Mista de Ultem/zif-8 para Separação de Gases. In: 12º Congresso Brasileiro de Polímeros (12º CBPol), 2013, Florianópolis. **Anais eletrônicos** [...] Florianópolis: UFSC, 2012. p. - . Disponível em: <http://e-democracia.com.br/cbpol/anais/2013/pdf/6EQB.pdf>  
Acesso em 26 jul. 2023

HAMM, Janice. “Membranas de carbono suportadas para a separação de gases”. Tese de doutorado - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia Química, Programa de Pós Graduação em Engenharia Química, Porto Alegre. 2018.  
Disponível em: <https://lume.ufrgs.br/handle/10183/183298>  
Acesso em 30 jan. 2023.

HERBST, M. et al. “Tecnologia dos nanotubos de carbono: tendências e perspectivas de uma área multidisciplinar”. Divulgação - Departamento de Física dos Sólidos, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro. 2004. Departamento de Química Inorgânica, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Cidade Universitária, Rio de Janeiro. 2004.  
Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/5yJnPKkTL9Lp8MDZkV9HJHC/?lang=pt#:~:text=Aplica%C3%A7%C3%B5es%20dos%20nanotubos%20de%20carbono&text=De%20um%20ponto%20de%20vista.em%20processos%20catal%C3%ADticos%2C%20por%20exemplo>  
Acesso em 15 mar. 2023.

Iijima S, Ichihashi T. 1993. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature* [Internet]. 363(6430):603–605.  
Disponível em: <http://www.nature.com/articles/363603a0>  
Acesso em 24 mar. 2023.

ISMAIL, A. F.; KHULBE, K. C.; TAKESHI, M. Gas Separation Membranes Polymeric and Inorganic. First Edit ed., p. 331. Ottawa, ON, Canada: Switzerland 2015, 2015.  
Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-01095-3>

LEITE e et al. “Estudo da dinâmica em redes de cristais anarmônicos”. Projeto de Pesquisa - Escola Politécnica, PUC - Goiás. Goiás 2017/2 - 2024/02  
Disponível em: <https://sistemas.pucgoias.edu.br/sigep/espelhoProjeto/show/151>  
Acesso em 04 mar 2023.

MAGALHÃES, Lana. Efeito Estufa. Toda Matéria, [s.d].  
Disponível em: <https://www.todamateria.com.br/efeito-estufa/> .  
Acesso em 18 mar. 2023.

PCC. “Grafeno - O que é e para que serve?”; PCC Group, 2022.  
Disponível em: <https://www.products.pcc.eu/pt/blog/grafeno-o-que-e-e-para-que-serve/>  
Acesso em 24 mar. 2023.