

Efecto de la composición de los gases de combustión en la captura de CO₂ por nanotubos de carbono: un estudio de simulación

María Isabel Romero-Hermida¹, José Manuel Romero-Enrique², Víctor Morales-Flórez^{1,3} y Luis Esquivias^{1,3}

¹ Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Sevilla, Avenida Reina Mercedes s/n 41012 Sevilla, España

² Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Universidad de Sevilla, Avenida Reina Mercedes s/n 41012 Sevilla, España

³ Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (CSIC/US), Av. Américo Vespucio 49, 41092 Sevilla, España.

En este trabajo se estudia la captura y separación de CO₂ procedente de gases de combustión mediante nanotubos de carbono de capa simple (en inglés *single-wall carbon nanotubes*, SWCNT). Estos sistemas nanoporosos han sido propuestos en la literatura como candidatos idóneos para la separación del CO₂ en mezclas de gases tales como N₂/CO₂ [1]. En este estudio hemos realizado simulaciones Monte Carlo en el colectivo gran-canónico, centrándonos en el proceso de adsorción selectiva de CO₂ por diferentes nanotubos de carbono. El gas de combustión se ha modelado como una mezcla ternaria de N₂, CO₂ y O₂ en condiciones realistas de temperatura T , presión p , y composición de la mezcla. Hemos considerado la dependencia de la capacidad de adsorción y la selectividad del CO₂ con las condiciones termodinámicas del gas de combustión, así como las propiedades estructurales del SWCNT, tales como su quiralidad y diámetro, que en este trabajo están restringidas a un rango entre 7 Å y 20 Å (véanse Figs. 1 y 2). Así, los SWCNT con diámetro alrededor de 7 Å muestran alta capacidad de adsorción y selectividad de CO₂, pero disminuyen abruptamente al aumentar el diámetro del SWCNT. Para los SWCNT de mayor diámetro, los valores de la capacidad de adsorción y la selectividad del CO₂ son mucho menores que en el caso estrecho, aunque en este caso esos valores decrecen de una manera más lenta con el diámetro del nanotubo. Para los valores intermedios del diámetro del SWCNT, las propiedades de adsorción de CO₂ muestran un comportamiento peculiar fuertemente dependiente de las condiciones termodinámicas de gas externo. Para concentraciones altas de CO₂ la capacidad de adsorción de CO₂ es muy elevada en un rango amplio de diámetros de SWCNT, aunque la selectividad correspondiente es moderada. Los resultados obtenidos pueden explicarse mediante el análisis de la estructura microscópica del gas adsorbido en el SWCNT (véase Fig. 3). En particular, se observa que en los SWCNT estrechos el gas confinado tiene características típicas de un líquido denso con una fracción molar de CO₂ mucho mayor que la correspondiente al gas externo. Por otro lado, en SWCNT anchos las propiedades del gas adsorbido son muy similares a las del gas externo salvo en una monocapa en contacto con la superficie interna del nanotubo.

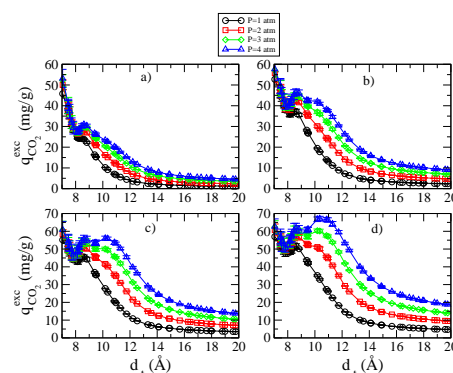


Figura 1: Capacidad de adsorción de CO₂ en función del diámetro del SWCNT para $T = 300$ K y (a) $y_{CO_2} = 0,05$, (b) $y_{CO_2} = 0,10$, (c) $y_{CO_2} = 0,15$ y (d) $y_{CO_2} = 0,20$. De abajo a arriba: $p = 1$ atm (círculos), $p = 2$ atm (cuadrados), $p = 3$ atm (rombos) y $p = 4$ atm (triángulos).

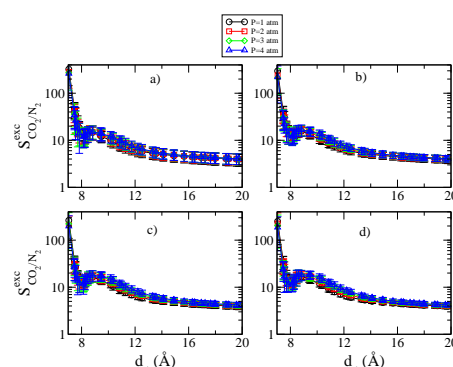


Figura 2: Selectividad del SWCNT para el CO₂ respecto al N₂ en función del diámetro del SWCNT para $T = 300$ K y (a) $y_{CO_2} = 0,05$, (b) $y_{CO_2} = 0,10$, (c) $y_{CO_2} = 0,15$ y (d) $y_{CO_2} = 0,20$. De abajo a arriba: $p = 1$ atm (círculos), $p = 2$ atm (cuadrados), $p = 3$ atm (rombos) y $p = 4$ atm (triángulos).

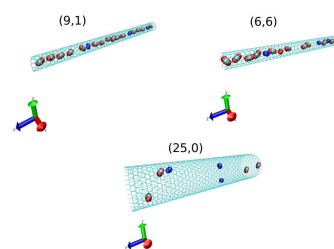


Figura 3: Configuraciones típicas del gas de combustión confinado en los SWCNT (9,1), (6,6) y (25,0). Las condiciones externas del gas de combustión son $p = 1$ atm, $T = 300$ K y fracción molar de CO₂ $y_{CO_2} = 0,1$.

[1] S. S. Razavi, S. M. Hashemianzadeh y H. Karimi, J. Mol. Model **17**, 1163 (2001)

[2] M. I. Romero-Hermida, J. M. Romero-Enrique, V. Morales-Flórez y L. Esquivias, J. Chem. Phys. **145**, 074701 (2016)