

Impacto da Água na Adsorção de CO₂ em Zeólitas LTA com Na⁺ e Ca²⁺: Uma Abordagem de Simulação

Geraldo Matheus G da Silva^{1,2}. Anderson Reis Albuquerque². Sibele B. Castella Pergher¹

¹g29.matheus@gmail.com Laboratório de Peneiras Moleculares – LABPEMOL – Instituto de Química – UFRN. Av. Senador Salgado Filho, 3000. Bairro Lagoa Nova. Natal RN 59072-970, Brasil.

²anderson.reis@ufrn.br Laboratório de Química Computacional - LQC - Instituto de Química – UFRN. Av. Senador Salgado Filho, 3000. Bairro Lagoa Nova. Natal RN 59078-970, Brasil.

RESUMO - Este estudo investiga o impacto dos cátions compensadores e da hidratação na adsorção de CO₂ em zeólitas LTA, ITQ-29 e suas versões hidratadas. A análise das isotermas revelou que a presença de água reduz a capacidade de captura de CO₂, com efeito mais acentuado nas zeólitas com cátions compensadores. A zeólita Ca-LTA, com cátions Ca²⁺, apresentou a maior capacidade de adsorção devido à polarização intensa causada pelos cátions divalentes. A Na-LTA, com cátions Na⁺, teve desempenho intermediário, enquanto a ITQ-29, sem cátions, teve o pior desempenho adsorptivo devido à sua estrutura hidrofóbica. A hidratação afetou a mobilidade do CO₂, restringindo o acesso aos sítios ativos e diminuindo a difusão do gás. A água também alterou as interações de CO₂ com a zeólita, tornando os sítios mais polarizados e aumentando a afinidade do gás. Esses resultados evidenciam que a presença de água e o tipo de cátion são cruciais para o desempenho adsorptivo, oferecendo insights para o desenvolvimento de materiais seletivos para captura de CO₂.

Palavras-chave: Zeólitas, Adsorção de CO₂, Hidratação, Cátions compensadores de carga, Seletividade.

ABSTRACT - This study investigates the impact of compensatory cations and hydration on CO₂ adsorption in LTA zeolites, ITQ-29, and their hydrated versions. The isotherm analysis revealed that the presence of water reduces CO₂ capture capacity, with a more pronounced effect in cation-exchanged zeolites. The Ca-LTA zeolite, with Ca²⁺ cations, showed the highest adsorption capacity due to the intense polarization caused by the divalent cations. Na-LTA, with Na⁺ cations, performed intermediately, while ITQ-29, without cations, exhibited the lowest adsorption capacity due to its hydrophobic structure. Hydration affected CO₂ mobility, restricting access to active sites and reducing gas diffusion. Water also altered CO₂ interactions with the zeolite, making the sites more polarized and increasing gas affinity. These results highlight that the presence of water and cation type are crucial for adsorption performance, providing insights for the development of selective CO₂ capture materials.

Keywords: Zeolites, CO₂ Adsorption, Hydration, Cation-exchanged, Selectivity.

Introdução

As zeólitas formam uma classe de materiais microporosos amplamente utilizados como adsorventes, catalisadores e trocadores iônicos, com destaque para suas aplicações em processos de separação e armazenamento de gases. Essas propriedades derivam de sua estrutura cristalina composta por unidades TO₄ (T = Si ou Al), organizadas em redes tridimensionais com poros e cavidades de tamanho molecular. A substituição de silício por alumínio na estrutura confere carga negativa ao esqueleto cristalino, que é neutralizada por cátions compensadores, influenciando diretamente as características físico-químicas do material ^(1,2).

A afinidade das zeólitas com moléculas polares, como a água, está diretamente relacionada à razão Si/Al e à natureza dos cátions presentes nos poros. Enquanto estruturas

puramente siliciosas apresentam comportamento hidrofóbico, a introdução de alumínio e íons compensadores aumenta o caráter hidrofílico. Essa versatilidade permite ajustar a interação com diferentes espécies químicas, o que é essencial para aplicações em ambientes com umidade variável, como ocorre na captura seletiva de gases em condições reais ^(3,4).

A zeólita LTA (Linde Type A) se destaca entre as zeólitas sintéticas por sua estrutura simples e excelente capacidade adsorptiva, composta por três canais perpendiculares interligados que oferecem seletividade, estabilidade térmica e flexibilidade para modificações estruturais e iônicas, tornando-a ideal para a adsorção seletiva de CO₂ ⁽⁵⁾. A substituição de cátions compensadores permite o controle de propriedades como polaridade e acidez, impactando diretamente os mecanismos de adsorção. Estudos recentes, especialmente com o uso de química computacional, têm

ressaltado como a presença de moléculas de água nos poros da zeólita pode influenciar a captura de CO₂, seja por competição por sítios ativos ou bloqueio de poros, tornando o efeito da hidratação uma variável crítica a ser investigada^(4,6,7).

Neste contexto, o presente trabalho investiga o impacto da troca iônica (Na⁺ → Ca²⁺) e da hidratação na capacidade adsorptiva da zeólita LTA para CO₂, com comparação à estrutura ITQ-29. Utilizando métodos de simulação computacional, foram obtidas isotermas de adsorção em condições anidras e hidratadas, possibilitando uma análise comparativa entre os materiais. O objetivo é avaliar como essas variáveis estruturais e ambientais afetam o desempenho adsorptivo, contribuindo para o desenvolvimento de sistemas mais eficazes para captura seletiva de CO₂.

Experimental

Metodologia Computacional para Modelagem e Simulação de Adsorção

A zeólita ITQ-29 foi utilizada como referência neste estudo devido à sua composição puramente silícica (SiO₂), que proporciona neutralidade elétrica e ausência de cátions compensadores. Sua geometria cristalina foi mantida sem modificações, servindo como base para comparar com as zeólitas LTA contendo cátions de carga positiva, permitindo isolar os efeitos eletrostáticos e estruturais na adsorção de CO₂.

As estruturas das zeólitas LTA foram geradas a partir de arquivos .cif disponíveis no banco de dados do BIOVIA Materials Studio. Com razão Si/Al = 1, cátions compensadores Na⁺ e Ca²⁺ foram inseridos usando o módulo Adsorption Locator, que emprega amostragem configuracional baseada em Monte Carlo com o campo de força COMPASS III^(6,7). As cargas parciais foram atribuídas pelo método qEq (charge equilibration), conforme parâmetros da literatura^(8,9), garantindo uma representação precisa das interações. Após identificar a configuração mais estável, cada sistema foi otimizado com o módulo Forcite, relaxando a geometria da rede cristalina e expandido em supercélulas 2×2×2, com oito unidades por sistema.

A distribuição dos cátions foi guiada por dados experimentais: Na⁺ foi alocado preferencialmente nos anéis de 8 e 4 membros (sítios I e III), enquanto Ca²⁺ ocupou majoritariamente os anéis de 6 membros (sítio II). O número de cátions respeitou a neutralidade das estruturas, resultando em 768 íons de sódio para Na-LTA e 384 de cálcio para Ca-LTA.

A hidratação das estruturas foi conduzida com o módulo Sorption Locate, inserindo 216 moléculas de H₂O por supercélula (27 por célula unitária), valor superior à média experimental (~9 mol H₂O/kg), mas eficaz para garantir

ocupação representativa dos sítios catiônicos e cavidades. Essa escolha favorece a análise das interações estruturais e energéticas entre água e cátions, além de permitir avaliar o impacto da hidratação no volume disponível para adsorção.

As simulações de adsorção foram realizadas com o método Grand Canonical Monte Carlo (μVT), por meio dos módulos Sorption e Adsorption do BIOVIA Materials Studio⁽⁹⁾. Primeiramente, a localização preferencial das moléculas de H₂O foi determinada. Em seguida, isotermas de adsorção de CO₂ foram geradas para seis sistemas distintos: ITQ-29, Na-LTA e Ca-LTA (anidras), e suas respectivas versões hidratadas (ITQ-29-H, Na-LTA-H, Ca-LTA-H). As simulações utilizaram o algoritmo de Metropolis com qualidade “fine”, 100.000 passos de equilíbrio e 1.000.000 de produção, variando a pressão de 0,6667 kPa a 999,917 kPa em 10 pontos logarítmicos, a 300 K.

As interações não-ligantes foram tratadas com somatórios de Ewald para forças de van der Waals e eletrostáticas, com precisão de 1,0×10⁻⁴ kcal/mol, cutoff de 12 Å e buffer de 0,5 Å. O carregamento médio de CO₂ por célula foi usado para construção das isotermas. O módulo Sorption também forneceu os calores isotérmicos de adsorção, enquanto o módulo Adsorption foi aplicado para calcular as energias de hidratação e adsorção com base nas configurações geradas.

Resultados e Discussão

Posição da Água e Impacto Estrutural nas Zeólitas

As simulações de localização indicaram que as moléculas de água ocupam preferencialmente as cavidades α e β da zeólita LTA, com a distribuição influenciada pelo tipo de cátion compensador. Na estrutura Na-LTA, a água se concentra na cavidade α, próxima aos íons Na⁺, formando redes de hidrogênio mais organizadas. Em contraste, na Ca-LTA, a água se distribui de forma mais uniforme entre as cavidades, resultado da maior força de atração dos íons Ca²⁺^(7,10).

Na zeólita ITQ-29, ausente de cátions compensadores, observou-se retenção reduzida de água e distribuição aleatória ao longo dos canais. As interações entre as moléculas de água e a estrutura são mais fracas, o que reflete o caráter hidrofóbico dessa rede puramente silícica⁽¹¹⁾. A Figura 1 ilustra a ocupação dos sítios pelas moléculas de H₂O nas três estruturas analisadas.

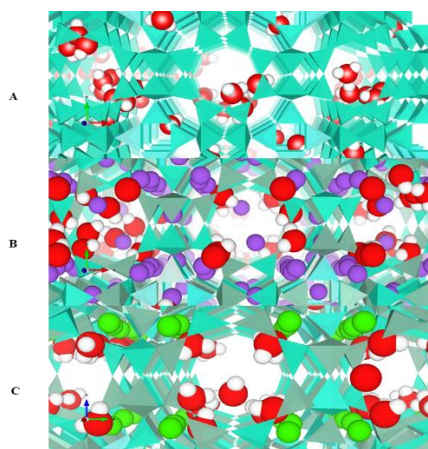


Figura 1. Visualização das moléculas de água nos sítios da Zeólitas. Estrutura A) ITQ-29, B) Na-LTA e C) Ca-LTA.

A presença de água nos poros provocou alterações estruturais significativas nas três zeólitas avaliadas. As principais mudanças foram a redução do volume livre e da área superficial acessível, especialmente nas estruturas trocadas com cátions. Na Na-LTA, a área superficial disponível foi reduzida de $30.223 \text{ \AA}^2$ para $9.468 \text{ \AA}^2$ após a hidratação, enquanto na Ca-LTA, a queda foi de $31.861 \text{ \AA}^2$ para $19.506 \text{ \AA}^2$. Esses dados sugerem obstrução parcial dos poros pelas moléculas de água, reduzindo a acessibilidade para adsorção.

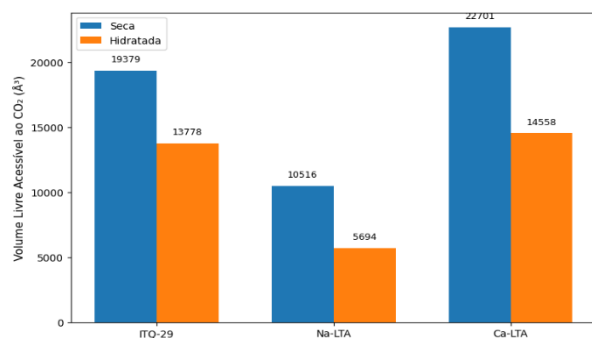


Figura 2. Gráfico comparativo do Volume Livre nas Zeólitas Secas e Hidratadas.

Conforme mostra a Figura 2, a hidratação reduziu o espaço disponível para difusão do CO_2 , com maior impacto nas estruturas trocadas com cátions. A limitação do volume livre compromete o transporte e a ocupação dos poros por moléculas de CO_2 , afetando diretamente a eficiência adsorptiva dos materiais.

Interações Água-Cátion e Estabilidade Estrutural

As distâncias médias entre as moléculas de água e os cátions compensadores indicam interações mais fortes na estrutura Ca-LTA ($2,1 \text{ \AA}$) em comparação à Na-LTA ($2,3 \text{ \AA}$), como mostra a Figura 3. Essa diferença reflete a maior

força eletrostática do cátion Ca^{2+} , que promove retenção mais eficiente de H_2O nos poros da estrutura. Já na ITQ-29, a ausência de cátions resulta em interações significativamente mais fracas, com distribuição desordenada das moléculas nos canais e alta mobilidade (translação média de $9,191 \text{ \AA}$)^(10,12,13).

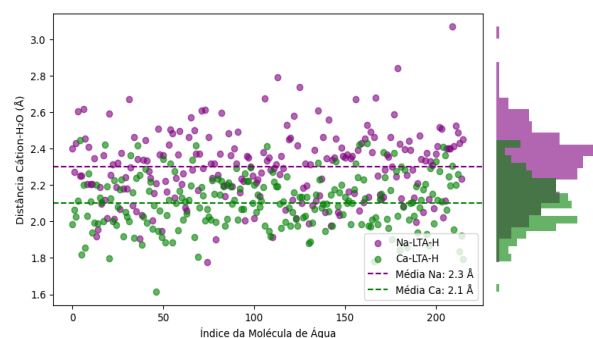


Figura 3. Gráfico da distribuição das distâncias das Moléculas de água para os cátions de Cálcio e Sódio

A influência da hidratação na estabilidade das estruturas foi avaliada pela variação da energia total (ΔE), obtida pela diferença entre os sistemas hidratados e secos. Todas as estruturas apresentaram ganho energético com a hidratação, sendo o mais expressivo na Ca-LTA, devido à forte interação entre H_2O e Ca^{2+} . A Tabela 1 resume os valores de energia total e a média por molécula de água.

Tabela 1. Energia dos sistemas secos e hidratados, e variação de energia (ΔE) em kcal/mol.

Estrutura	Cátion	ΔE (kcal/mol)	ΔE por H_2O (kcal/mol)
ITQ-29	—	$-3,10 \times 10^6$	-14,4
Na-LTA	Na^+	$-2,65 \times 10^6$	-12,3
Ca-LTA	Ca^{2+}	$-3,79 \times 10^6$	-14,2

Os valores obtidos estão em acordo com dados teóricos da literatura, que reportam energias de hidratação entre -15 e -20 kcal/mol por H_2O em estruturas com cátions. O maior ganho energético da Ca-LTA reforça o papel estabilizador dos cátions divalentes, enquanto a menor variação na ITQ-29 está associada à ausência de sítios eletrostáticos ativos, refletindo seu caráter hidrofóbico.

Esses achados demonstram que a natureza do cátion influencia diretamente a organização da água no interior dos poros, afetando tanto a estrutura local quanto a estabilidade termodinâmica das fases hidratadas. A análise conjunta das distâncias, mobilidade e energia de hidratação corrobora estudos anteriores sobre o papel central dos cátions na interação água-zeólita^(14,15,16).

Adsorção, Energia de Adsorção e Mobilidade do CO₂ nas Estruturas Secas e Hidratadas

A análise das isotermas de adsorção revelou diferenças marcantes entre as estruturas secas e hidratadas das zeólitas ITQ-29, Na-LTA e Ca-LTA (Figura 4). A presença de cátions compensadores e a hidratação influenciaram diretamente a capacidade adsorptiva das estruturas. A Ca-LTA seca apresentou o maior carregamento de CO₂, alcançando cerca de 986 moléculas por célula, atribuída à elevada polarização local promovida pelos cátions Ca²⁺. A Na-LTA também adsorveu quantidades relevantes, embora menores, refletindo a menor força eletrostática do Na⁺. A ITQ-29, por sua vez, apresentou a menor capacidade adsorptiva, devido à ausência de cátions e ao caráter hidrofóbico de sua rede.

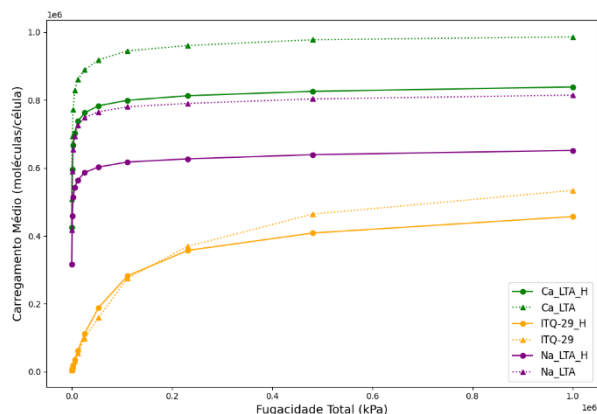


Figura 4. Gráfico de isotermas de adsorção de CO₂, nas estruturas secas e hidratadas

A presença de água nas estruturas reduziu consideravelmente a adsorção de CO₂, com destaque para Na-LTA-H e Ca-LTA-H. A água competiu com o gás pelos sítios ativos e restringiu o volume livre nos poros. Além disso, a rede de ligações de hidrogênio formada pela H₂O alterou o ambiente polar local, afetando a afinidade com o CO₂. Na ITQ-29-H, a redução foi menos expressiva, indicando que a hidratação tem impacto secundário em materiais de baixa polaridade. As diferenças entre as curvas hidratadas sugerem que fatores como temperatura, concentração de água e rearranjos estruturais influenciam a complexidade do processo adsorptivo^(14,15).

A energia média de adsorção do CO₂ apresentou variações entre as estruturas secas e hidratadas (Tabela 2). Na ITQ-29, a energia caiu levemente de 6,76 para 6,66 kcal/mol, sinalizando uma interferência mínima da água. Nas zeólitas com cátions, entretanto, a energia aumentou significativamente: de 1,23 para 1,66 kcal/mol na Na-LTA e de 1,30 para 2,02 kcal/mol na Ca-LTA. Esse aumento

sugere que a água intensifica a polarização local nos poros, tornando os sítios mais atrativos para o CO₂⁽¹⁵⁾.

A mobilidade do CO₂, avaliada pela translação média, também foi afetada. Em todas as estruturas, a presença de H₂O reduziu a liberdade de deslocamento do gás. Na Ca-LTA, a mobilidade caiu de 7,81 Å (hidratada) para 1,58 Å (seca), e na Na-LTA de 6,93 para 1,41 Å. A água atuou como barreira física e energética, ocupando os sítios mais energéticos e forçando o CO₂ a migrar para regiões menos favoráveis^(15,17,18,19).

Tabela 2. Energia média de adsorção e mobilidade do CO₂ nas zeólitas.

Estrutura	Energia Adsorção (kcal/mol)	Mobilidade CO ₂ (Å)
ITQ-29 Seca	6,76	6,82
ITQ-29 Hidratada	6,66	5,83
Na-LTA Seca	1,23	1,41
Na-LTA Hidratada	1,66	6,93
Ca-LTA Seca	1,30	1,58
Ca-LTA Hidratada	2,02	7,81

Além disso, a água apresentou mobilidade superior ao CO₂, especialmente na Ca-LTA, devido ao seu menor tamanho e maior adaptabilidade às cavidades. Apesar disso, ela se adsorveu fortemente nos sítios energéticos, reduzindo a seletividade e a taxa de difusão do gás. Esses dados indicam que a presença de água não apenas bloqueia sítios ativos, mas também altera a dinâmica interna da adsorção, afetando simultaneamente afinidade e mobilidade do CO₂. A combinação desses efeitos revela a importância de considerar o estado de hidratação ao projetar materiais para captura seletiva de gases^(19,20).

Calores Isotérmicos na Adsorção de CO₂

A análise dos calores isotérmicos médios de adsorção revelou a influência significativa das características estruturais das zeólitas, da presença de cátions compensadores e da hidratação nas interações com o CO₂ (Figura 5). De maneira geral, os calores isotérmicos apresentaram um padrão decrescente à medida que a fugacidade aumentava. Em baixas pressões, as moléculas de CO₂ ocupam preferencialmente os sítios mais energéticos, como os associados aos cátions, enquanto em pressões mais

altas, a adsorção se dá nos sítios menos favoráveis, resultando na redução do calor médio de adsorção.

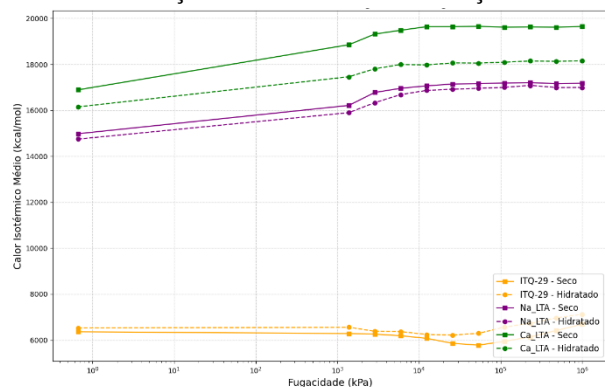


Figura 5. Gráfico de calor médio isotérmico na adsorção de CO₂, nas estruturas secas e hidratadas.

A ITQ-29, sem cátions compensadores, apresentou os menores calores isotérmicos, indicando que a adsorção se dá por interações físicas fracas, como as forças de van der Waals. A versão hidratada (ITQ-29-H) mostrou uma leve diminuição adicional, sugerindo que a água restringe a acessibilidade aos sítios ativos e atua como uma barreira difusional (21,22,23).

Na Na-LTA, os calores isotérmicos foram significativamente mais altos, refletindo interações mais fortes com os cátions Na⁺. Com a hidratação (Na-LTA-H), os valores aumentaram ainda mais, indicando que a água cria uma reorganização estrutural que favorece a formação de sítios cooperativos entre Na⁺, H₂O e CO₂. Essa configuração potencializa a retenção do gás, mas também está associada à redução da mobilidade do CO₂ (10,20,21,22).

A Ca-LTA apresentou os maiores calores isotérmicos, devido à maior carga do cátion Ca²⁺ e à polarização induzida. Na versão hidratada (Ca-LTA-H), o calor isotérmico médio atingiu seu pico, indicando que a água estabiliza sítios altamente energéticos, o que favorece a adsorção do CO₂, embora a mobilidade do gás seja severamente restringida (7,10,20,21,22).

Esses resultados confirmam que a natureza do cátion e o estado de hidratação têm um impacto crucial na força das interações CO₂-zeólita. A ITQ-29 exibe interações físicas mais fracas, enquanto as zeólitas LTA com Na⁺ e Ca²⁺ mostram interações eletrostáticas mais fortes, intensificadas pela presença de água. Isso é essencial para o desenvolvimento de materiais eficientes para captura seletiva de CO₂.

Conclusões

Os resultados deste estudo demonstram que tanto o tipo de cátion compensador quanto o estado de hidratação da zeólita LTA desempenham um papel crucial no desempenho adsorptivo de CO₂. As isotermas de adsorção indicaram que

a presença de água reduz significativamente a capacidade de captura, com impacto mais pronunciado nas zeólitas trocadas com cátions. Essa redução é atribuída à ocupação de sítios preferenciais pelas moléculas de H₂O, à diminuição do volume livre e à formação de barreiras que dificultam a difusão do gás.

A Na-LTA apresentou uma afinidade intermediária por CO₂, com maior capacidade adsorptiva em sua forma anidra devido às interações eletrostáticas com Na⁺, mas com perda considerável de mobilidade e capacidade após a hidratação. A Ca-LTA, com cátions Ca²⁺, obteve os maiores calores isotérmicos, e a presença de água intensificou ainda mais essa interação, sugerindo a formação de sítios altamente energéticos por meio de interações cooperativas entre CO₂, H₂O e Ca²⁺.

A estrutura ITQ-29, sem cátions compensadores, serviu como referência de comportamento físico, exibindo a menor capacidade de adsorção e energia de interação. Em contraste, as zeólitas com cátions apresentaram adsorção fortemente influenciada pela polarização local, confinamento e efeitos estruturais induzidos pela água.

O estudo das isotermas, calores isotérmicos, mobilidade e topologia dos poros evidenciou que a hidratação altera não só a acessibilidade física dos sítios, mas também influencia suas interações e o caráter energético. Esses achados são importantes para o desenvolvimento de adsorventes mais seletivos e para a compreensão das reações de captura de CO₂ em diferentes condições.

Agradecimentos

Laboratório de Peneiras Moleculares (LABPEMOL). Laboratório de Química Computacional (LQC), Instituto de Química da UFRN e as bolsas financiadas pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Referências

1. COLLINS, Fiona et al. A critical review of waste resources, synthesis, and applications for Zeolite LTA. *Microporous and mesoporous Materials*, v. 291, p. 109667, 2020.
2. SMITH, Joseph V. *Tetrahedral Frameworks of Zeolites, Clathrates and Related Materials*. Volume 14. Subvolume A. New York: Springer - Verlag Berlin Heidelberg, 2000. 266 p. (Physical Chemistry - Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology).
3. CAILLIEZ, Fabien et al. Thermodynamic study of water intrusion in hydrophobic zeolites by Monte Carlo

- simulations. In: Studies in surface science and catalysis. Elsevier, 2008. p. 683- 688
4. CAILLIEZ, Fabien et al. Thermodynamic study of water intrusion in hydrophobic zeolites by Monte Carlo simulations. In: Studies in surface science and catalysis. Elsevier, 2008. p. 683- 688
 5. GIANETTO, G. P.; MONTES, A. R.; RODRÍGUEZ, G. F. Zeolitas - Características, Propriedades y Aplicaciones Industriales. Editorial Innovación Tecnológica, 2ª edição, 1990.
 6. CHEUNG, Ocean et al. Highly selective uptake of carbon dioxide on the zeolite| Na 10.2 KCs 0.8|-LTA—a possible sorbent for biogas upgrading. Physical Chemistry Chemical Physics, v. 18, n. 24, p. 16080-16083, 2016.
 7. STARKE, A. et al. Impact of Na⁺ and Ca²⁺ Cations on the Adsorption of H₂S on Binder-Free LTA Zeolites. Adsorption Science and Technology, v. 2021, 2021.
 8. ZHANG, Manjie et al. Insights moleculares sobre propriedades de adsorção e difusão de CO₂/CH₄ em zeólitas ZSM-5 trocadas por cátions. The Journal of Physical Chemistry C , v. 128, n. 16, p. 6962-6970, 2024.
 9. GARCÍA-SÁNCHEZ, Almudena et al. Influence of force field parameters on computed diffusion coefficients of CO₂ in LTA-type zeolite. Microporous and mesoporous materials, v. 158, p. 64-76, 2012.
 10. LEWIS, Dewi W. et al. Modelling of hydrated Ca-rich zeolites. Molecular Simulation, v. 28, n. 6-7, p. 649-661, 2002.
 11. PALOMINO, Miguel et al. Preparation of continuous highly hydrophobic pure silica ITQ-29 zeolite layers on alumina supports. Molecules, v. 25, n. 18, p. 4150, 2020.
 12. CALERO, Sofia; GÓMEZ-ÁLVAREZ, P. Effect of the confinement and presence of cations on hydrogen bonding of water in LTA-type zeolite. The Journal of Physical Chemistry C, v. 118, n. 17, p. 9056-9065, 2014.
 13. PRODINGER, Sebastian; DEREWINSKI, Mirosław A. Recent progress to understand and improve zeolite stability in the aqueous medium. Petroleum Chemistry, v. 60, p. 420-436, 2020.
 14. GÓMEZ-ÁLVAREZ, Paula et al. Impact of the nature of exchangeable cations on LTA-type zeolite hydration. The Journal of Physical Chemistry C, v. 120, n. 40, p. 23254-23261, 2016.
 15. HIGGINS, F. Manon; DE LEEUW, Nora H.; PARKER, Stephen C. Modelling the effect of water on cation exchange in zeolite A. Journal of Materials Chemistry, v. 12, n. 1, p. 124-131, 2002.
 16. ZWIJNENBURG, Martijn A.; BROMLEY, Stefan T. Zeolite synthesis: an energetic perspective. Physical Chemistry Chemical Physics, v. 12, n. 43, p. 14579-14584, 2010.
 17. GREN, Wojciech et al. Structure of zeolite A (LTA) surfaces and the zeolite A/water interface. The Journal of Physical Chemistry C, v. 114, n. 21, p. 9739-9747, 2010.
 18. NO, Kyoung Tai; JHON, Mu Shik. Theoretical Study of Hydration of Zeolite NaA. Journal of the Korean Chemical Society, v. 23, n. 6, p. 374-384, 1979.
 19. OKELLO, Felix Otieno et al. Towards estimation and mechanism of CO₂ adsorption on zeolite adsorbents using molecular simulations and machine learning. Materials Today Communications, v. 36, p. 106594, 2023.
 20. SUN, H. et al. Energetics of sodium–calcium exchanged zeolite A. Physical Chemistry Chemical Physics, v. 17, n. 17, p. 11198-11203, 2015
 21. CALERO, Sofia; GÓMEZ-ÁLVAREZ, P. Effect of the confinement and presence of cations on hydrogen bonding of water in LTA-type zeolite. The Journal of Physical Chemistry C, v. 118, n. 17, p. 9056-9065, 2014.
 22. HYLÁ, Alexander S. et al. Significant temperature dependence of the isosteric heats of adsorption of gases in zeolites demonstrated by experiments and molecular simulations. The Journal of Physical Chemistry C, v. 123, n. 33, p. 20405-20412, 2019.
 23. MARTIN-CALVO, Ana et al. Unravelling the influence of carbon dioxide on the adsorptive recovery of butanol from fermentation broth using ITQ-29 and ZIF-8. Physical Chemistry Chemical Physics, v. 20, n. 15, p. 9957-9964, 2018.