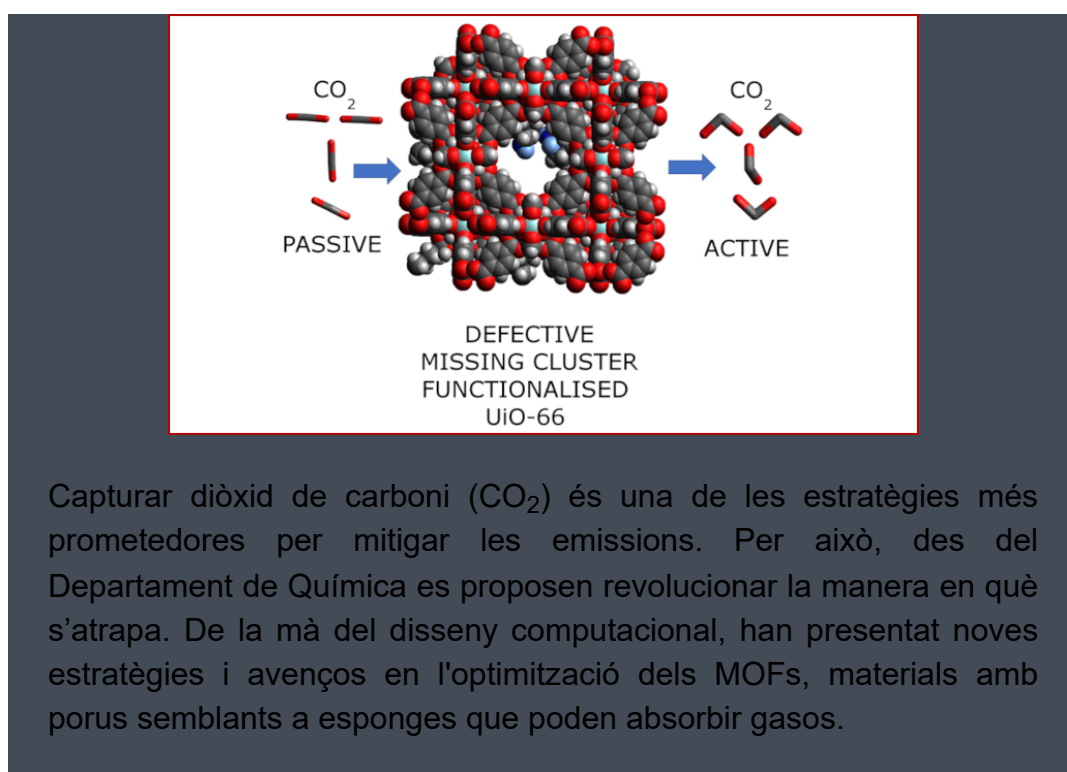


17/03/2025

Com podem revolucionar la captura del CO_2 ? Disseny computacional al rescat del clima



La lluita contra el canvi climàtic és urgent, i capturar diòxid de carboni (CO_2) és una de les estratègies més prometedores per marcar la diferència. En la nostra investigació, ens vam proposar dissenyar materials capaços de revolucionar la manera com capturem i emmagatzemem el CO_2 . Quin és el nostre enfocament? Els *metal-organic frameworks* (MOFs), materials fascinants amb porus semblants a esponges que poden absorbir gasos. Però no ens vam aturar aquí: volíem fer que aquests MOFs fossin encara més versàtils afegint-hi modificacions posteriors.

Utilitzant el MOF "UiO-66", vam incorporar grups amino que actuen com a "ganxos" moleculars per atrapar les molècules de CO_2 . En inserir aminoàcids a les superfícies internes del MOF, vam analitzar com la longitud de la cadena afecta la seva capacitat per capturar CO_2 . Gràcies a experiments computacionals, vam descobrir que no totes les

amines funcionen de la mateixa manera. Els aminoàcids de cadena curta, com la glicina i la beta-alanina, no estaven prou a prop entre si per cooperar. No obstant això, quan vam utilitzar cadenes més llargues, com l'àcid gamma-aminobutíric i l'àcid 5-aminovalèric, va passar quelcom extraordinari. Aquestes cadenes més llargues van permetre que els grups amino formessin enllaços d'hidrogen, estabilitzant les molècules de CO₂ dins del MOF.

Aquesta interacció cooperativa fins i tot va donar lloc a una transformació fascinant, la conversió del CO₂ en àcid carbàmic mitjançant un mecanisme de doble transferència d'hidrogen. El més emocionant és l'eficiència d'aquestes modificacions. Per exemple, en el cas de l'àcid 5-aminovalèric, només va caldre modificar el 16% dels llocs disponibles per capturar CO₂ de manera efectiva. Això suposa un avenç significatiu cap al desenvolupament de materials més econòmics i escalables. També vam descobrir que la protonació de les amines pot potenciar encara més la seva interacció amb el CO₂, oferint una altra via prometedora d'optimització.

El nostre treball no s'acaba aquí. Ja som al laboratori, sintetitzant i provant aquests MOFs modificats per convertir els nostres dissenys en realitat. Combinant perspectives computacionals amb validació experimental, estem obrint el camí cap a materials de nova generació que podrien jugar un paper clau en la reducció de les emissions de CO₂. Això no es tracta només de capturar carboni, sinó de construir un futur més verd i sostenible.

Gerard Pareras Niell; Albert Rimola Gibert

Departament de Química

Universitat Autònoma de Barcelona

Marco Taddei

Departament de Química i Química Industrial

Università di Pisa

Davide Tiana

School of Chemistry

University College Cork

gerard.pareras@uab.cat; albert.rimola@uab.cat; marco.taddei@unipi.it; davide.tiana@ucc.ie

Referències

Pareras, G., Rimola, A., Taddei, M., Tiana, D. (2024). **Computationally aided design of defect-appended aliphatic amines for CO₂ activation within UiO-66.** *Physical Chemistry Chemical Physics*, 26(42), 26958-26965. <https://doi.org/10.1039/D4CP03223C>

[View low-bandwidth version](#)