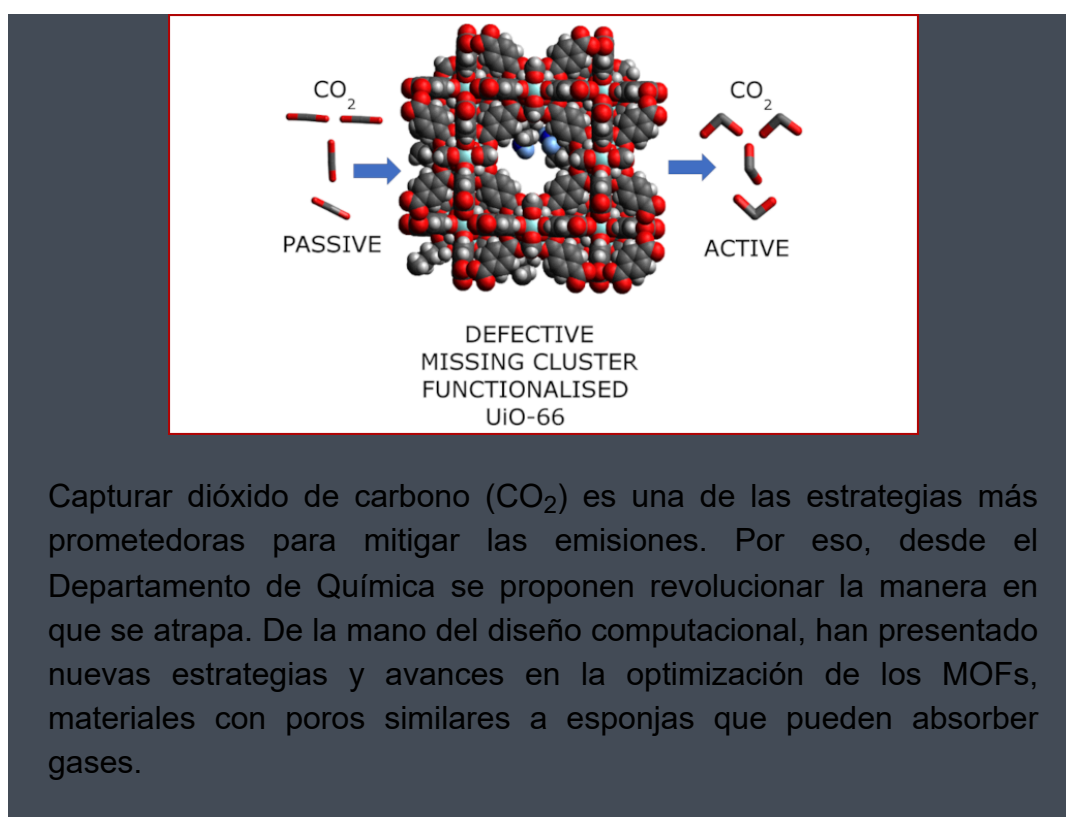


17/03/2025

¿Cómo podemos revolucionar la captura del CO₂? Diseño computacional al rescate del clima



La lucha contra el cambio climático es urgente, y capturar dióxido de carbono (CO₂) es una de las estrategias más prometedoras para marcar la diferencia. En nuestra investigación, nos propusimos diseñar materiales capaces de revolucionar la manera en que atrapamos y almacenamos CO₂. ¿Nuestro enfoque? Los *metal-organic frameworks* (MOFs), materiales fascinantes con poros similares a esponjas que pueden absorber gases. Pero no nos detuvimos ahí: quisimos hacer que estos MOFs fueran aún más versátiles añadiendo modificaciones posteriores.

Utilizando el MOF “UiO-66”, incorporamos grupos amino que actúan como “ganchos” moleculares para atrapar las moléculas de CO₂. Al insertar aminoácidos en las superficies

internas del MOF, analizamos cómo la longitud de la cadena afecta su capacidad para capturar CO₂. Gracias a experimentos computacionales, descubrimos que no todas las aminas funcionan de la misma manera. Los aminoácidos de cadena corta, como la glicina y la beta-alanina, no estaban lo suficientemente cerca entre sí para cooperar. Sin embargo, al emplear cadenas más largas, como el ácido gamma-aminobutírico y el ácido 5-aminovalérico, ocurrió algo extraordinario. Estas cadenas más largas permitieron que los grupos amino formaran enlaces de hidrógeno, estabilizando las moléculas de CO₂ dentro del MOF.

Esta interacción cooperativa incluso dio lugar a una fascinante transformación: la conversión del CO₂ en ácido carbámico mediante un mecanismo de transferencia doble de hidrógeno. Lo más emocionante es la eficiencia de estas modificaciones. Por ejemplo, en el caso del ácido 5-aminovalérico, bastó con modificar solo el 16% de los sitios disponibles para capturar CO₂ de manera efectiva. Esto supone un avance significativo hacia el desarrollo de materiales más económicos y escalables. También descubrimos que la protonación de las aminas puede potenciar aún más su interacción con el CO₂, ofreciendo otra vía prometedora de optimización.

Nuestro trabajo no termina aquí. Ya estamos en el laboratorio, sintetizando y probando estos MOFs modificados para llevar nuestros diseños a la realidad. Combinando perspectivas computacionales con validación experimental, estamos allanando el camino hacia materiales de nueva generación que podrían desempeñar un papel clave en la reducción de las emisiones de CO₂. Esto no se trata solo de capturar carbono, sino de construir un futuro más verde y sostenible.

Gerard Pareras Niell; Albert Rimola Gibert

Departamento de Química
Universitat Autònoma de Barcelona

Marco Taddei

Departamento de Química y 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

Referencias

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>