

SEMINÁRIO DIA 07/10/2022

Sala S.114 – Prédio Reuni – 10 horas

“Avaliação computacional do potencial das Redes Metalorgânicas para atuar em questões ambientais e de segurança”.

Dra. Carla Vieira Soares (UFJF)

Enfoque:

As Redes Metalorgânicas (MOFs) são um grupo promissor de materiais cristalinos devido à ampla gama de propriedades físicas e químicas que podem ser exploradas e à variedade de aplicações relevantes envolvendo armazenamento de gases, separação molecular, captura e degradação de agentes neurotóxicos, conversão de energia, entre outras. O potencial destes sólidos porosos, construídos a partir de subunidades inorgânicas (SBU) e ligantes orgânicos, se deve ao fato de que quase todos os elementos da tabela periódica podem ser utilizados na síntese desses materiais. Atualmente, existem mais de 80.000 estruturas registradas no banco de dados da Cambridge Structural. Neste sentido, a química computacional age como uma ferramenta poderosa auxiliando na triagem desses materiais visando aplicações específicas, obtenção e predição de propriedades relevantes, bem como no entendimento de resultados experimentais.

