

Investigação in silico da Mg-Mof-74 para remoção de espécies de arsênio em água

Aluna: Sabrina Grigoletto

Orientador: Prof. Heitor Aveino de Abreu

Coorientadora: Profa. Aline de Oliveira



Data: 16/02/2022, quarta-feira

Horário: 14:00 h

plataforma: Microsoft Teams

link: [https://teams.microsoft.com/l/channel/19%3azpg-](https://teams.microsoft.com/l/channel/19%3azpg-klBhFxpVuAd0vdtEnwrfawalNJQoOCwWQIZSKis1%40thread.tacv2/Geral?groupId=75ef80c5-087f-49da-866e-b294db1fe0d1&tenantId=64126139-4352-4cd7-b1fb-2a971c6f69a6)

[klBhFxpVuAd0vdtEnwrfawalNJQoOCwWQIZSKis1%40thread.tacv2/Geral?groupId=75ef80c5-087f-49da-866e-b294db1fe0d1&tenantId=64126139-4352-4cd7-b1fb-2a971c6f69a6](https://teams.microsoft.com/l/channel/19%3azpg-klBhFxpVuAd0vdtEnwrfawalNJQoOCwWQIZSKis1%40thread.tacv2/Geral?groupId=75ef80c5-087f-49da-866e-b294db1fe0d1&tenantId=64126139-4352-4cd7-b1fb-2a971c6f69a6)



Banca examinadora:

Prof. Guilherme Ferreira de Lima (Departamento de Química - UFMG)

Prof. João Paulo Ataíde Martins (Departamento de Química - UFMG)

Resumo:

O arsênio é um metal altamente tóxico que por meio da ação antropogênica e de fenômenos naturais de sedimentação e lixiviação pode contaminar corpos hídricos. A ingestão de águas contaminadas com esse elemento pode causar intoxicações crônicas que provocam a perda de funcionalidades no organismo e podem ocasionar o desenvolvimento de tumores. A Organização Mundial de Saúde (OMS) estima que cerca de 150 milhões de pessoas no mundo consumam águas contaminadas com arsênio. Diante dessa estatística, a OMS definiu essa questão como prioritária na busca por soluções. Em meio a essa problemática, materiais para adsorção e remoção das espécies de arsênio estão sendo amplamente estudados. Em estudos realizados, a MOF-74 se apresentou como um material promissor para remoção de arsênio em meio aquoso. Neste trabalho foi investigada a adsorção de espécies de arsênio na Mg-MOF-74 com o objetivo de indicar possíveis materiais para remoção desse elemento em água. Também, foi avaliado o efeito de possíveis interferentes, de modo a verificar espécies que competem pelo sítio de adsorção. Para isso, foram realizadas simulações e cálculos computacionais que utilizam a Teoria do Funcional de Densidade. Os resultados obtidos permitiram verificar aspectos eletrônicos, termodinâmicos e mecanísticos dos processos de adsorção das moléculas com arsênio, os quais se apresentaram favoráveis e promissores.