

Dessalinização da água por membranas nanoporosas de MoS₂: o papel de geometria e química dos poros no transporte de água e íons

Rodrigo Fedrizzi Dillenburg
orientadora: Marcia C. Barbosa

A escassez de água é um problema crescente no mundo, estima-se que até 2025 ele afetará 2,7 bilhões de pessoas. Apesar de cobrir dois terços da superfície do planeta apenas 2,5% da água do mundo é doce. Nas regiões mais secas do mundo já são empregados processos de dessalinização da água do mar para a obtenção de água potável. A tecnologia mais moderna na área é a técnica de Osmose Reversa, onde pressão mecânica é aplicada sobre um reservatório de água salgada que atravessa uma membrana que filtra a maior parte do sal, produzindo água doce.

Este processo tem uma enorme demanda energética o que o torna extremamente caro e restringe a sua utilização em larga escala. Utilizando-se de avanços no campo da nanociência pesquisadores estão trabalhando na próxima geração de membranas de dessalinização que prometem reduzir em mais de 100 vezes esse gasto com energia. O uso de membranas extremamente finas, com espessuras de alguns átomos, adornadas com nanoporos com diâmetros na faixa de 1 nanometro, 100 mil vezes menor que a espessura de um fio de cabelo, são capazes de filtrar de forma eficiente o sal da água do mar ao mesmo tempo em que permitem a passagem de grandes quantidades de água.

Nesse trabalho foram realizadas simulações para elucidar os fenômenos físicos por trás desse processo de remoção de sal utilizando nanoporos de dissulfeto de molibdênio. Este é um mineral que ocorre naturalmente e que pode ser transformada em uma membrana extremamente fina com apenas 3 átomos de espessura. Utilizando simulações de dinâmica molecular é possível simular no nível microscópico o que acontece durante o processo, como se fosse um video game regido pelas leis da física. Isso nos permite observar muito detalhadamente o comportamento das moléculas de água e dos íons de sal dentro e ao redor destes nanoporos. Manipulando no computador algumas características da membrana como tamanho dos poros e sua distribuição de cargas é possível entender como ela interage com cada átomo do sistema, gerando informações valiosas sobre como escolher o melhor material para sua confecção e sobre o tamanho dos nanoporos necessário para otimizar o processo.

Por se tratar de uma área de pesquisa ainda muito nova, trabalhos envolvendo simulações são muito importantes para guiar a pesquisa dos cientistas tentando confeccionar tais sistemas. Conhecendo a física que rege a dessalinização no nível microscópico os pesquisadores da área experimental podem determinar a priori quais materiais e formatos de nanoporos não serão viáveis e não desperdiçar tempo e recursos tentando produzi-los em laboratório, podendo assim focar em membranas mais promissoras.