

FÍSICA

Um filtro diferente

“Buracos interligados” em membranas de óxido de grafeno ajudam a separar a água do álcool

Simulações computacionais feitas por um grupo de físicos das universidades Estadual de Campinas (**Unicamp**) e Federal do ABC (UFABC) forneceram uma explicação para uma propriedade singular de membranas feitas de óxido de grafeno, folhas de estrutura hexagonal formadas majoritariamente por átomos de carbono e um pequeno número de átomos de oxigênio e de hidrogênio. Tão finas quanto um átomo, quando empilhadas umas sobre as outras, essas membranas formam uma estrutura capaz de atuar como um filtro para separar os constituintes de uma solução homogênea – mistura de dois ou mais líquidos cujos componentes não são mais distinguíveis a olho nu.

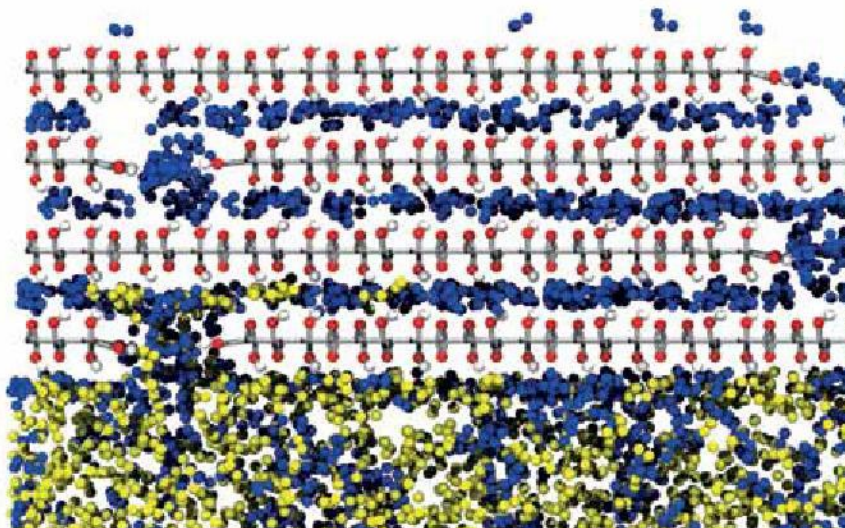
A mistura estudada pelos pesquisadores incluía 50% de água e 50% de álcool (etanol ou metanol). As membranas de óxido de grafeno deixavam passar a água e retinham o álcool. Segundo o modelo teórico proposto pelos físicos, essa particularidade se deve à formação de “buracos interligados” entre as membranas pelos quais as moléculas de água passam todas juntas, deixando para trás as de álcool. O funcionamento desse labirinto molecular que atrai apenas a água foi descrito em um trabalho publicado em fevereiro na revista científica *Carbon*.

As propriedades de filtragem das membranas de óxido de grafeno são bastante conhecidas experimentalmente. “Mas agora conseguimos descrever de forma mais abrangente e detalhada o que ocorre nesse processo”, explica o físico Douglas

Galvão, da **Unicamp**, um dos autores do trabalho. Não se trata de uma filtragem mecânica em que moléculas de certo tamanho passam pela malha do grafeno enquanto outras, maiores, ficam retidas. É um mecanismo que envolve atração química. “As membranas de óxido de grafeno incham e apresentam maior espaçamento entre os seus planos. Assim, formam-se canais bidimensionais que induzem a passagem da água”, diz Pedro Autreto, da UFABC, outro autor do estudo.

Dentro desses labirintos bidimensionais, a presença dos átomos de oxigênio nas folhas de grafeno faz os átomos de hidrogênio das moléculas de água formarem pontes ou ligações de hidrogênio. Mal comparando, é como se apenas as moléculas de água dessem as mãos para sair do labirinto formado pelas membranas de óxido de grafeno. A eficiência do processo depende do grau de oxidação das membranas. “Quando o grafeno é puro, formado apenas por átomos de carbono, mas sem oxigênio, ocorre uma inversão na seletividade da membrana”, comenta a física Daiane Damasceno Borges, que faz estágio de pós-doutorado na Unicamp e participou do trabalho. “Nes-

O desenho mostra um filtro com quatro camadas de óxido de grafeno, que separa as moléculas de água (●) das de álcool (●). “Buracos” entre as membranas atraem quimicamente as moléculas de água, que deixam as de álcool para trás



● Água ● Álcool ●-○ Óxido de grafeno

se caso, passam pelo filtro as moléculas de álcool ao invés das de água”, complementa Cristiano Woellner, também pós-doutorando da **Unicamp**.

Apesar do caráter teórico, o trabalho pode ser útil para a criação de novos tipos de filtros, mais eficientes e baratos. “Simulações como essas permitem um grande controle de variáveis e podem guiar o desenvolvimento de biocombustíveis, nos quais é preciso separar o etanol da água”, comenta o físico Leandro Seixas, do Centro de Pesquisas Avançadas em Grafeno, Nanomateriais e Nanotecnologias (MackGraphe), da Universidade Presbiteriana Mackenzie, que não participou do estudo. ■ **Victória Flório**

Projeto

Centro de Engenharia e Ciências Computacionais – CECC (nº 13/08293-7); Modalidade Programa Centros de Pesquisa, Inovação e Difusão (Cepid); Pesquisador responsável Munir Salomão Skaf (**Unicamp**); Investimento R\$ 18.478.546,78 (para todo o projeto).

Artigo científico

BORGES, D. D. *et al.* Insights on the mechanism of water-alcohol separation in multilayer graphene oxide membranes: Entropic versus enthalpic factors. *Carbon*. v. 127, p. 280-6. fev. 2018.