



# PREVISÃO DO TAMANHO DE POROS EM ESTRUTURAS METAL-ORGÂNICAS (MOFs) ATRAVÉS DE REDES NEURAIS

Caio Eduardo Palatin de Souza, Danielle dos Santos Chagas, Gabriel Xavier Pereira, Gustavo Alves Beneti

Ilum Escola de Ciência



## Introdução

Metal Organic Frameworks (MOFs) são classes de materiais porosos compostos por clusters de íons ou metais, interligados por ligantes orgânicos. O ajuste de poros dos MOFs permite uma modificação mais previsível e precisa, resultando em materiais altamente eficientes e seletivos nas áreas de adsorção, catálise, separação e armazenamento [1]–[3].

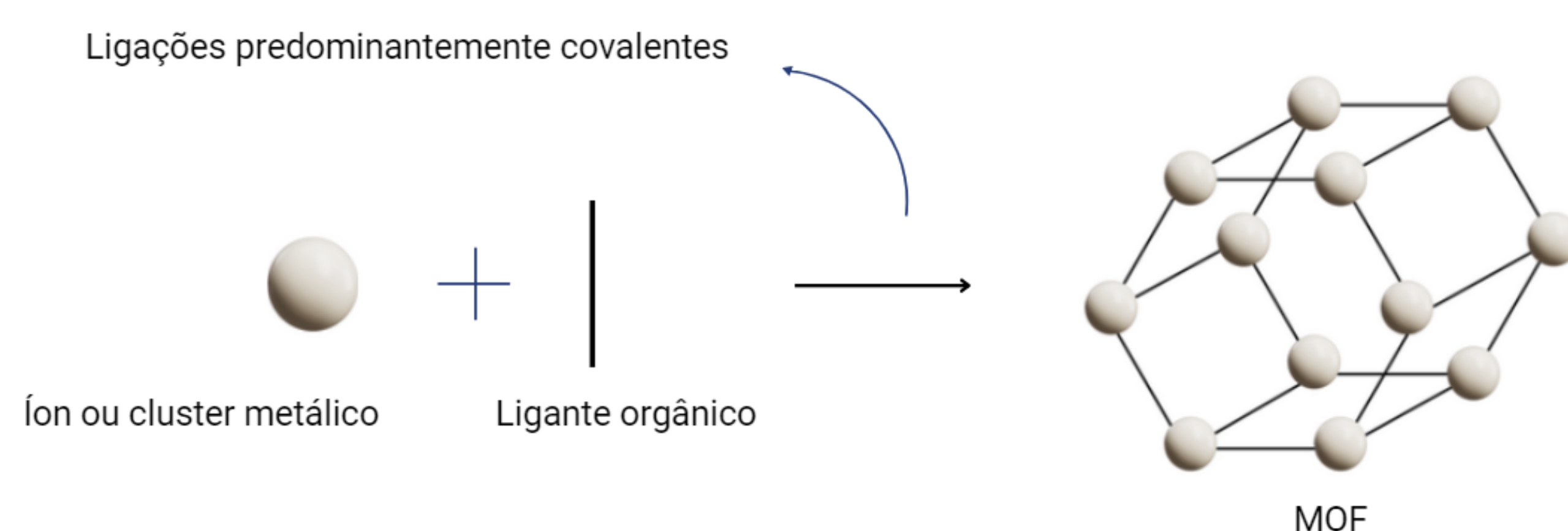
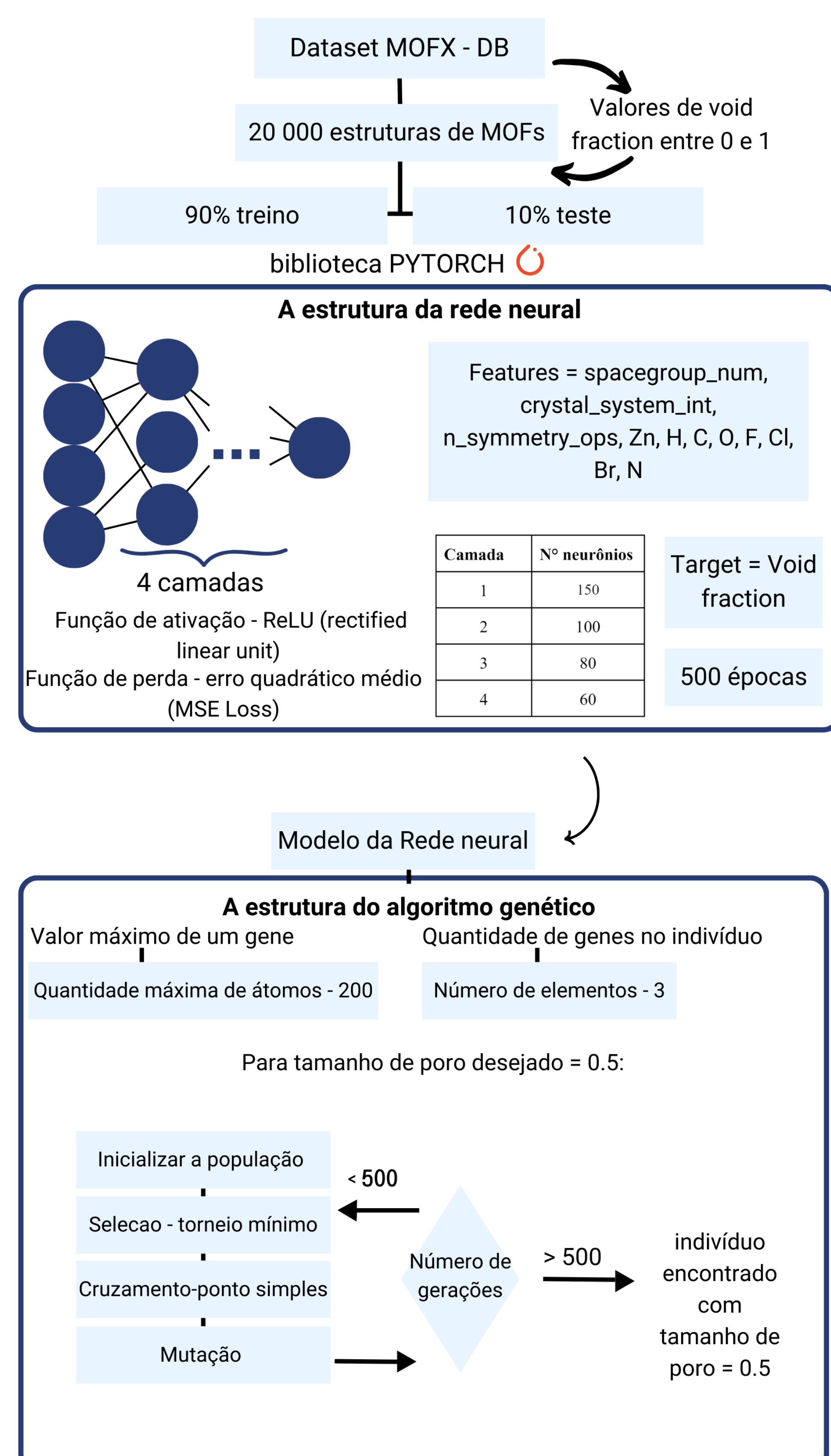


Figure 1. Representação das MOFs

## Objetivos

- Utilizar redes neurais para prever o tamanho do poro de um MOF;
- A partir de algoritmos genéticos encontrar a estrutura de uma MOF que possua um tamanho de poro desejado.

## Materiais e Métodos (Metodologia)



## Resultados e Discussões

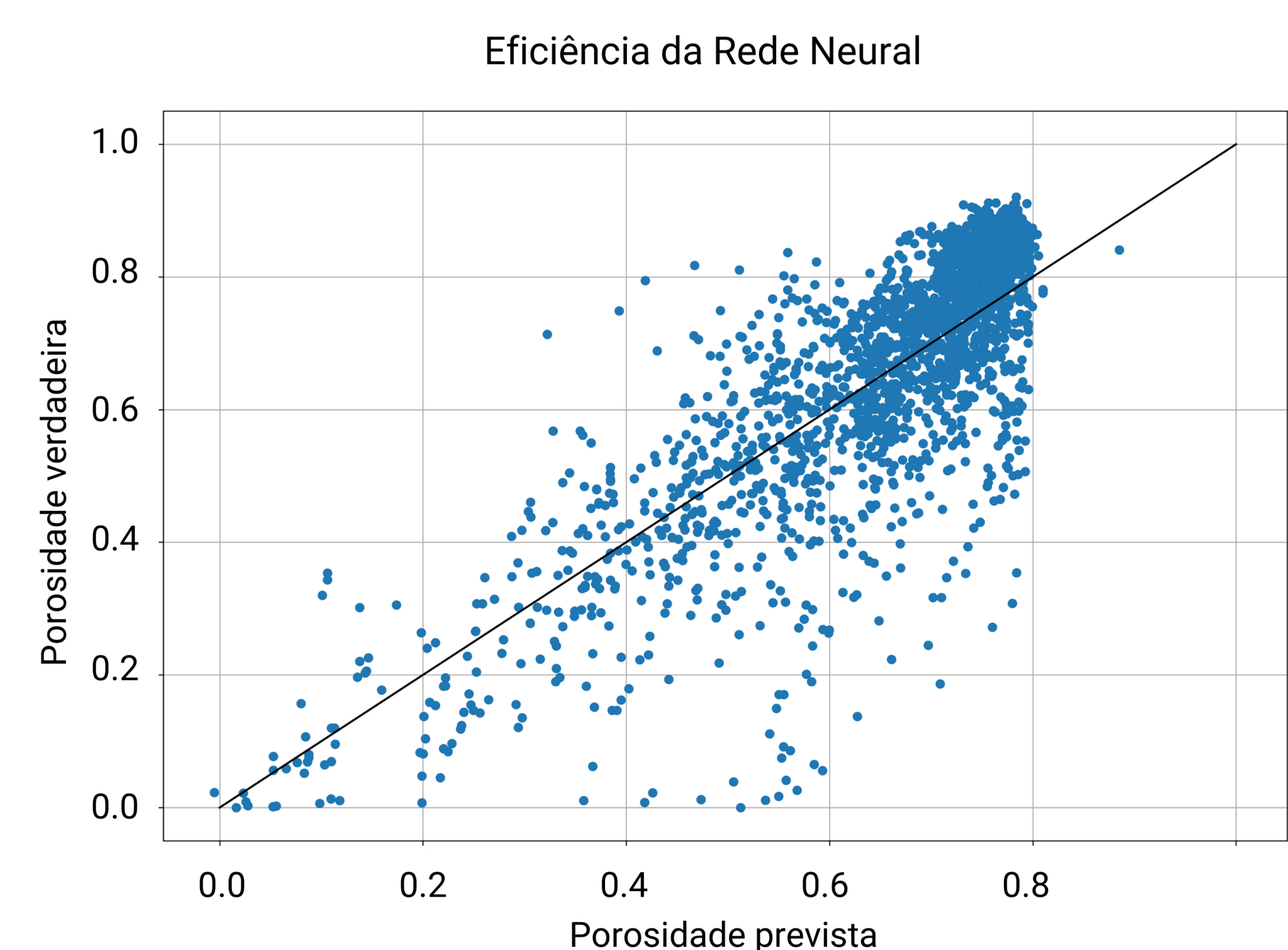


Figure 2. Gráfico de análise da eficiência da rede neural. Os eixos representam a porosidade prevista pela porosidade verdadeira.

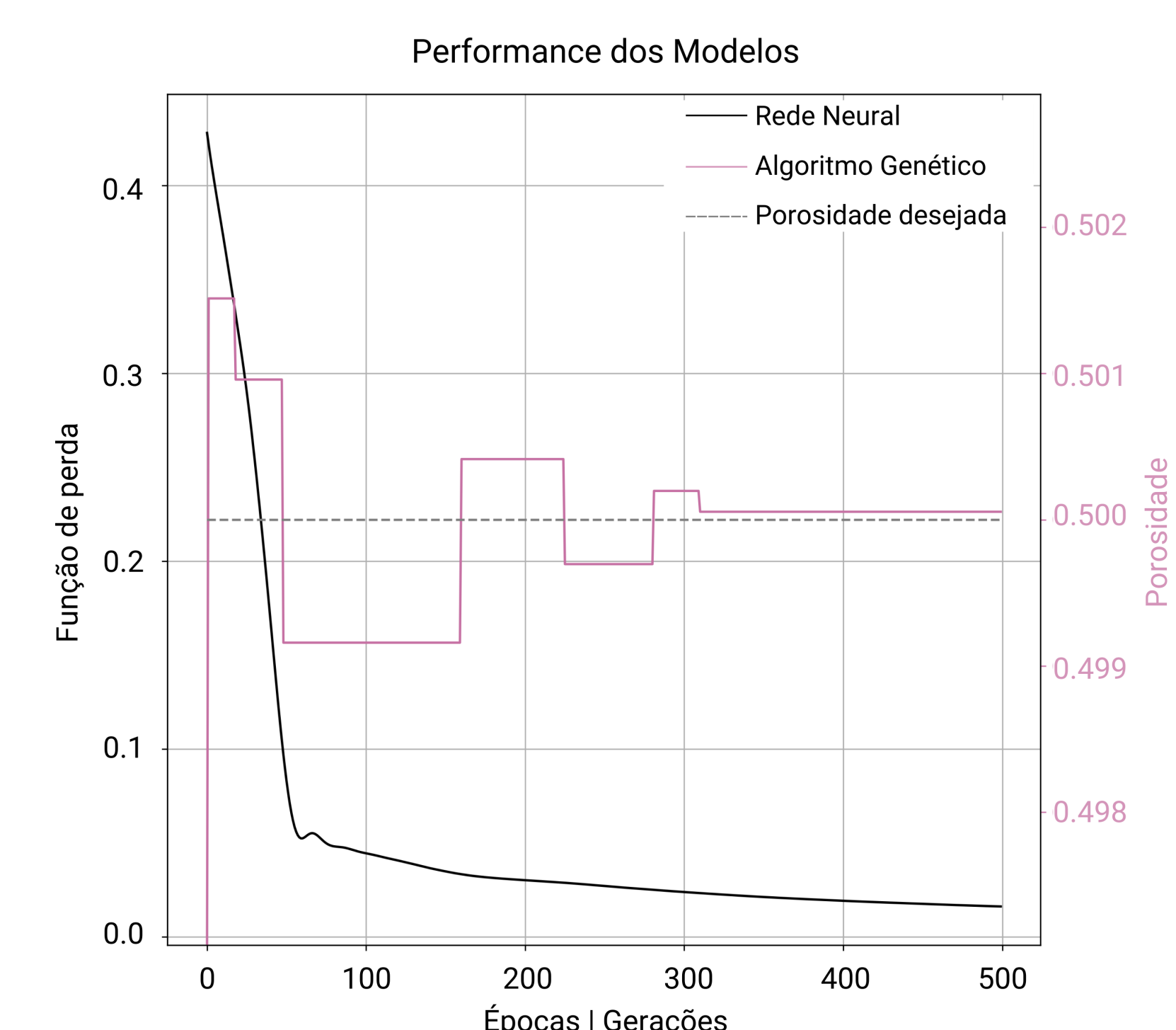


Figure 3. Gráfico de performance e comparação entre os modelos de redes neurais e algoritmos genéticos.

## Conclusões

Conclui-se que a rede neural convergiu bem na previsão do tamanho do poro de uma MOF, tendo uma baixa função de perda. Os algoritmos genéticos convergiram rapidamente para o tamanho de poro desejado, de forma que, não foram necessárias muitas gerações. Acesso ao projeto em [4].

## Agradecimentos



## Referências

- H.-C. ". Zhou and S. Kitagawa, "Metal-organic frameworks (mofs)," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 43, pp. 5415–5418, 2014. doi: 10.1039/C4CS90059F.
- J. Wang, Y. Zhang, Y. Su, and et al., "Fine pore engineering in a series of isorecticular metal-organic frameworks for efficient c2h2/co2 separation," *Nature Communications*, vol. 13, p. 200, 2022. doi: 10.1038/s41467-021-27834-7.
- Y. Zhang and et al., "Rational design of microporous mofs with anionic boron cluster functionality and cooperative dihydrogen binding sites for highly selective capture of acetylene," *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 59, pp. 17 664–17 669, 2020. doi: 10.1002/anie.202005356.
- G. X. Pereira, *Redes neurais e mofs*, [https://github.com/gabrielxvr/NN\\_and\\_MOFs\\_Illum](https://github.com/gabrielxvr/NN_and_MOFs_Illum), 2023.