



Simulación molecular del proceso de adsorción en materiales microporosos

A. Gordillo Sol^{1,2}, E. Reguera² y H. Yee Madeira³.

¹ Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y Tecnologías Avanzadas del Instituto Politécnico Nacional, IPN 2580. Col Barrio la laguna Ticomán

² Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del Instituto Politécnico Nacional, Legaria 694. Colonia Irrigación, 11500 México D. F.

³ Escuela Superior de Física y Matemáticas del Instituto Politécnico Nacional, UPALM s/n, Colonia Lindavista

Resumen

Los materiales nanoporosos moleculares tienen muchas potenciales aplicaciones, entre ellas para almacenar H₂, con el objetivo de usarse en celdas de hidrógeno como fuente de energía alternativa. Se plantea entonces realizar la simulación computacional del proceso de adsorción de H₂ en materiales nanoporosos para tener una mejor comprensión de éste y así, eventualmente poder diseñar materiales nanoporosos con energía de adsorción y cantidades adsorbidas apropiadas a requerimientos tecnológicos.

Introducción

Ante la creciente necesidad de obtener nuevas fuentes de energía, una opción son las llamadas celdas de hidrógeno que proveen energía limpia. Se han realizado mediciones experimentales del proceso de adsorción de H₂ en diversos materiales microporosos, obteniendo información del proceso [1,2]. Sin embargo no se tiene una entera comprensión de las interacciones entre la molécula de hidrógeno y la superficie de los materiales nanoporosos. Aquí es donde la simulación molecular se presenta como una manera de realizar experimentos *virtuales*, cuyos resultados podemos comparar en principio con los obtenidos de experimentos *reales*. Con la simulación buscamos entender el proceso de difusión de la molécula de hidrógeno en las cavidades de los materiales de interés, así como las posiciones en las que se podría encontrar al lograr un equilibrio. Actualmente algunos grupos han realizado simulación de procesos de adsorción en materiales porosos como zeolitas, carbones y otros materiales [3,4], nuestro interés se centra en algunos cianometalatos. Para lograr el objetivo primero se debe tener conocimiento de los distintos métodos de simulación computacional para entre ellos elegir el o los más apropiados. Entre los métodos a evaluar podemos mencionar Simulación Molecular (SM), que comprende variaciones del método Monte Carlo (Monte Carlo de Gran Canónico, Monte Carlo del Colectivo de Gibbs, etc); teorías de termodinámica estadística como la teoría del funcional de densidad (DFT por sus siglas en inglés), la cual sirve para resolver problemas cuánticos muy complejos, trabajando con la densidad electrónica en lugar de la función de onda y colocando a la energía como un funcional de la densidad. Existen también Modelos

Semiempíricos, que dan resultado independiente de la distribución del tamaño de poro y modelos de Termodinámica Clásica [5].

Procedimiento Experimental

Para logra el objetivo se plantean los siguientes puntos:

- Elección de modelo simulación. El modelo elegido debe poder describir los parámetros de interés como los potenciales químicos, además se considera el poder de cómputo requerido y la reproducibilidad de los experimentos virtuales obtenidos. Debido a las restricciones propias de cada modelo, evaluaremos la posibilidad de usar al menos dos, uno para el equilibrio y otro para la dinámica molecular.
- Elección de software y hardware. Se utilizará alguno(s) del (los) software disponibles como Abinit, CASTEP, Fireball, Gromacs y otros, en concordancia con las necesidades. Se planea utilizar computadoras corriendo en paralelo para disminuir el tiempo de ejecución.
- Determinación de los potenciales intramoleculares adecuados y la función que determine la distribución de tamaño de poro.
- Ejecución de la simulación y comparación con valores experimentales reales.
- Ejecución de la simulación para predicción de propiedades buscadas.

Agradecimientos

Agradecemos al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) y a la Secretaria de Investigación y Posgrado (SIP) del Instituto Politécnico Nacional (IPN) por su apoyo a este trabajo.

Referencias

- [1] L. Reguera, J. Balmaceda, L. F. del Castillo, E. Reguera; *J. Phys. Chem. C.* (2008), In Press.
- [2] L. Reguera, J. Balmaceda, C. P. Krap, E. Reguera; *J. Phys. Chem. C.* (2008), In Press
- [3] F. Javier Torres, Jenny G. Vitillo, Bartolomeo Civalleri, Gabriele Ricchiardi, and Adriano Zecchina; *The J. Phys. Chem. Lett. C.* **111**: 1871 (2007).
- [4] Petrova N.V., Yakovkin I.N., Ptushinskii Y.G.; *Surf. Sci.* **497**, No. 1: 349 (2002).
- [5] Christian M. Lastoskie, Keith E. Gubbins; *Advances in Chemical Engineering* **28**: 203 (2001).