



Simulación molecular del proceso de adsorción en materiales microporosos II

A. Gordillo-Sol¹, E. Reguera¹ y H. Yee-Madeira²

¹Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del Instituto Politécnico Nacional, Legaria 694. Colonia Irrigación, 11500 México D. F.

²Escuela Superior de Física y Matemáticas del Instituto Politécnico Nacional, U.P.A.L.M. Edif. 9, Colonia Lindavista, 07738 México D. F.

Resumen

En este trabajo reportamos resultados de simulaciones computacionales de búsqueda de configuraciones estables en la interacción de moléculas de hidrógeno con átomos de Ni y Cu.

Introducción

En el estudio de la interacción del hidrógeno con metales y superficies metálicas se ha reportado que existe un diferente comportamiento cuando se consideran paquetes de unos cuantos átomos del metal en cuestión a cuando se considera un volumen.

Cuando se trata de estudiar el proceso de adsorción de hidrógeno en materiales microporosos, es conocido que son de gran importancia la interacción de las moléculas de hidrógeno con los átomos de la superficie en el interior. Es por ello que en este trabajo buscamos comprender la interacción entre la molécula de hidrógeno y átomos de metales, a decir Cu y Ni. En este aspecto se han reportado configuraciones estables entre el Ni, Ni⁺ [1].

Para el primer caso Niu et al reportan una configuración estable con una sola molécula de hidrógeno y para Ni⁺ cinco configuraciones, con 1, 2, 4 y 6 moléculas de hidrógeno.

Procedimiento

Utilizamos el método del campo autoconsistente de combinación lineal de orbitales atómicos por medio del programa Gaussian 03w[2] para realizar la optimización de geometría. Para ello, el cálculo de las contribuciones electrostáticas y de gradiente de campo al potencial se realizó por medio del método de Hartree-Fock sin restricciones (UHF) y se utilizó la teoría de la perturbación de muchos cuerpos de Möller-Plesset hasta cuarto orden para incluir la correlación. Para ambos, Ni y Cu, utilizamos una base de Huzinaga de valencia dividida, modificada para incluir polarización.

Resultados y Análisis

La figura 1 muestra los resultados de las optimizaciones de geometría, habiendo obtenido 2 posibles configuraciones para Ni, una para Ni⁺ y una para Cu, en todos los casos con una molécula de hidrógeno.

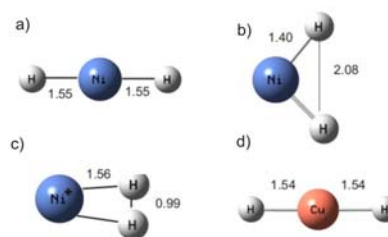


Figura 1. Geometrías estudiadas de Ni neutro a), b) y catiónico c), así como de cobre neutro d).

El valor de la distancia Ni-H de la configuración a) está en concordancia con lo reportado por Niu et al, sin embargo hemos encontrado una configuración extra para el Ni neutro, mostrado en b). Asimismo la configuración de geometría para Ni catiónico corresponde en forma, más sin embargo en nuestros cálculos el H se encuentra más cercano al Ni. Como era de esperarse, para el Cu neutro se tiene un resultado similar al obtenido con Ni, en el cual la molécula de H se disocia en dos átomos de hidrógeno. Esto se puede explicar porque el átomo de Ni “dona” aproximadamente .2 electrones a cada átomo de hidrógeno, dicha carga se transfiere al orbital de antienlace de la molécula, debilitando el enlace y como consecuencia se disocia.

Referencias

- [1] D. Fournier, JP Roger, A. Bellouati, C. Boué, H. Stam and F. Lakestani. *Analytical Science*. **17**: s158 (2001).
- [2] Gaussian 03, Revision E.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, et al, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.