



SIMULACIÓN DE PROCESOS DE ADSORCIÓN EN MATERIALES LAMINARES

Cynthia Maldonado¹, Carlos Aguirre¹, Cercis Morera¹ y Edilso Reguera¹

¹Centro de Investigación en Ciencia aplicada y Tecnología Avanzada del IPN, Unidad Legaria,

Legaria 694, Col. Irrigación, México.

bacrj_1993@hotmail.com

Uno de los usos más importantes de los materiales nanoporosos es la adsorción de gases en su interior con diversos fines como la sustentabilidad energética. Dentro de esta gran familia de materiales nanoporosos han llamado la atención en los últimos años los llamados materiales laminares ciano-niquelatos. Dichos materiales se estructuran por planos que se forman en la estructura a través de un metal de ensamble (Co, Ni, Fe) unido a 4 grupos cianos en una coordinación cuadrado plana en los ejes XY, mientras que en el eje vertical está conectado a anillos (piridina o imidazol), que funcionan como pilar de soporte entre las láminas[1]. El presente trabajo presenta un estudio teórico, para estudiar por primera vez, la adsorción de gases (H_2 , CH_4 , CO_2) utilizando cálculos mecano-cuánticos (ab initio, DFT y DFT-periódico) en materiales laminares cianoniquelatos. Se eligieron 6 materiales: $Co(Im)_2[Ni(CN)_4]$, $Ni(Im)_2[Ni(CN)_4]$, $Fe(Im)_2[Ni(CN)_4]$, $Co(py)_2[Ni(CN)_4]$, $Ni(py)_2[Ni(CN)_4]$ $Fe(py)_2[Ni(CN)_4]$. Se ha observado que algunos de éstos materiales presentan en su estructura planos ondulados y otros planos rectos. Por lo que se realizó un análisis de la estructura para encontrar los factores de la densidad electrónica que influyen en la forma de estos planos en los diferentes casos de estudio. Para este análisis se midieron las distancias del metal de ensamble (Ni, Co, Fe) al nitrógeno tanto del anillo (piridina o imidazol) como al del grupo ciano. De igual manera se calcularon las cargas de los centros metálicos, del nitrógeno tanto del grupo ciano como de los anillos para las diferentes estructuras. El análisis anterior se realizó con un nivel de cálculo DFT/B3LYP/6-31G(d,p). Ese análisis se complementa con un análisis de la densidad electrónica utilizando el funcional BVP86 y los métodos de Átomos en Moléculas (AIM) y de Orbitales Naturales de enlace (NBO).

Por otro lado, se pretende realizar un mapa de potencial electrostático de las celdas unitarias de los sistemas a través del uso de cálculos de primeros principios, utilizando DFT con ondas planas y pseudopotenciales PAW mediante el uso del programa Quantum Espresso. Esto nos permitirá analizar la densidad electrónica de estos sistemas periódicos, y entender las diferencias en la adsorción de especies en su interior, así como visualizar las regiones del espacio hacia las que se sentirían atraídas partículas cargadas positivamente (regiones de potencial electrostático negativo) o negativamente (regiones de potencial electrostático positivo).

González, M; Lemus-Santana, A.A; Rodríguez-Hernández, J; Knobel, M; Reguera, E; *J. Solid State Chem.* **2013**, 197.