



Estudio teórico de la interacción entre la HY-zeolita y el óxido de vanadio elucidando la pérdida de actividad.

Irineo Pedro Zaragoza Rivera¹

¹Instituto Tecnológico de Tlalnepantla, DEPI, Av. Mario Colín S/N, Col. La comunidad,
Tlalnepantla de Baz, Estado de México; México
izaragoza@ittla.edu.mx

El estudio de la interacción entre la HY-zeolita y el óxido de vanadio se realizó aplicando el software NWChem para los cálculos de dinámica. La molécula de VO con un ímpetu inicial promueve la interacción que se estudia por medio de las propiedades electrónicas. El primer modelo consiste en el óxido de vanadio penetrando en el centro del anillo de la zeolita, y el segundo modelo es cuando el óxido de vanadio impacta en la superficie de la zeolita. Los cálculos de dinámica se usan para determinar la reducción de la actividad catalítica, así como elucidar una eventual degradación de la HY-zeolita debido a la presencia del óxido de vanadio. En el primer caso, los resultados muestran un rompimiento de enlace en el sitio ácido separando el H⁺, dicho rompimiento se relaciona con una etapa inicial de la pérdida de actividad de la HY zeolita. El segundo modelo es considerado para simular la superficie de la zeolita, el óxido de vanadio con diferentes velocidades iniciales en la dinámica presenta una fuerza de atracción débil y termina por ser adsorbido en la superficie de la zeolita. Para los cálculos se utilizó la teoría de funcionales de la densidad en combinación con la aproximación Born-Oppenheimer, con un conjunto de funciones base doble numérica considerando funcionales de intercambio y correlación (Becke88-LYP) para el cálculo de la estructura electrónica.

Referencia:

[1] Zaragoza, I. P.; Santamaria, R.; Salcedo, R. *J. Mol. Catal. A: Chem*, **2009**, 307(1), 64-70

Agradecimientos:

I.P. Zaragoza, agradece al Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, por los recursos computacionales, el apoyo y la asistencia técnica a través del proyecto número: **P-2016/007**.