



Análisis de la Difusión de Aniones Inter Laminares utilizando el Método de Monte-Carlo Cinético

Guillermo Nieto-Malagón, Cristina Cuautli, Joel Ireta Moreno

Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, A. P. 55-534, México D.F. 09340, México

nieto65@xanum.uam.mx

Los Hidróxidos Dobles Laminares (HDL) son compuestos formados por el apilamiento de capas de hidróxidos metálicos cargados positivamente y capas negativas de aniones solvatados. Pueden ser de origen natural o sintético. En estos compuestos se puede cambiar tanto los cationes de las láminas como el tipo de anión interlaminar, lo que permite que las HDLs tengan muchas aplicaciones como catalizadores, portadores de sustancias activas en la industria farmacéutica, medios de absorción de contaminantes iónicos etc. Recientemente se ha estudiado su capacidad de conducción iónica controlada con la finalidad de aplicarlos en el diseño de supercondensadores eléctricos, que son dispositivos complementarios en los nuevos sistemas de almacenamiento de energía [1]. En este trabajo se investiga la influencia de la composición metálica de la lámina sobre los procesos difusivos de los aniones interlaminares, así como el efecto de la temperatura sobre dichos procesos. Para el análisis de los procesos de difusión se aplicó el método de Monte-Carlo Cinético (MCC) [2]. El MCC requiere como datos de entrada las barreras energéticas entre puntos vecinos del sustrato, así como un factor que mide el número de intentos que hace el sistema antes de cruzar una barrera. Para obtener los valores de las barreras energéticas y las posiciones de mínima energía para los aniones interlaminares, se calculó la superficie de energía potencial asociada a los aniones OH^- y Cl^- para $\text{Mg}_3\text{Al}(\text{OH})_2$, $\text{Mg}_3\text{Ga}(\text{OH})_2$, $\text{Zn}_3\text{Al}(\text{OH})_2$, $\text{Zn}_3\text{Ga}(\text{OH})_2$ y $\text{Mg}_3\text{Al}(\text{Cl})_2$, usando la teoría de los funcionales de la densidad [3]. La relación metal di-valente/ tri-valente se mantuvo constante e igual a 3. Se calcularon los coeficientes de difusión a diferentes temperaturas a partir del desplazamiento cuadrático medio y de los intervalos de tiempo de difusión (relación de Einstein) [4]. Se muestra que tanto Mg como Ga favorecen la difusión del anión interlaminar.

Referencias:

- 1 F. Li and X. Duan, *Applications of layered double hydroxides in Layered Double Hydroxides, Structure and Bonding*, edited by X. Duan and D. G. Evans (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2005), pp. 194–217.
- 2 A.P.J. Jansen. *An Introduction to Kinetic Monte Carlo Simulation of Surface Reactions*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2012).
- 3 C. Cuautli, J. Ireta, *J. Chem. Phys.* 142, 094704 (2015).
- 4 X. Yang and A. Hassanein, *Fusion Engineering and Design* 89 (2014) 2545.