

Efectos dispersivos en zeolitas silícicas

Angel M. Albavera¹, Alberto Vela¹ y Claudio Zicovich²

¹Centro de Investigación y de Estudios Avanzados; México

²Universidad Autónoma del Estado de Morelos; México

malbavera@cinvestav.mx

Las zeolitas son cristales de alta porosidad con cavidades vinculadas que pueden formar sistemas de canales por toda su estructura, lo que les confiere áreas superficiales internas muy grandes. Se distinguen unas de otras por sus diferencias estructurales en sus celdas unitarias constituidas esencialmente por silicio y oxígeno dispuestos en tetraedros formando bloques que pueden unirse unos con otros en combinaciones variadas¹.

Empleando la Teoría de Kohn y Sham, se analizó el desempeño de diversos funcionales de intercambio y correlación (XC) que corresponden a distintos peldaños en la escalera de Perdew². Especial atención se presta a dos nuevas familias de funcionales XC³ y al efecto de las fuerzas de dispersión de largo alcance⁴ sobre la estabilidad relativa en una serie de 15 zeolitas silícicas⁵.

Los resultados muestran que cuando se emplea una corrección adecuada para incluir fuerzas dispersivas, los cálculos se aproximan satisfactoriamente a la tendencia experimental, evidenciando que en sistemas cristalinos porosos las interacciones de largo alcance pueden generar diferencias energéticas grandes.

- [1] Meier, W. M.; Olson, D. H. *Atlas of Zeolite Structures*, Butterworth, 6th ed.; Elsevier: London, 1996.
- [2] Perdew, J. P.; Schmidt, K. *Density Functional Theory and its Application to Materials*, editado por Van, Doren, V. E.; Van Alsenoy, C.; Geerlings, P. AIP: Melville, New York, 2001.
- [3] Pacheco-Kato, J.; del Campo, J. M.; Gázquez, J. L.; Trickey, S. B.; Vela A. A PW91-like exchange with a simple analytical form. *Chem. Phys. Lett.* **2016**, 651, 268-273.
- [4] Grimme, S. Accurate description of van der Waals complexes by density functional theory including empirical corrections. *J. Comput. Chem.* **2004**, 25, 1463-1473.
- [5] Román-Román, E. I.; Zicovich-Wilson, C. M. The role of long-range van der Waals forces in the relative stability of SiO₂-zeolites. *Chem. Phys. Lett.* **2015**, 619, 109-114.