



Estudio teórico de la absorción de colorantes contaminantes en la arquitectura metal-orgánica MOF-5.

Daniel Aarón Pardo Mejía¹, Gregorio Guzmán Ramírez¹, Iran F. Hernández Ahuactzi¹

¹ Centro Universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara, Av. Nuevo Periférico 555, Ejido San José Tatepozco, Tonalá 48525, Jalisco, México.

I.Fernando.Hernández@cutonala.udg.mx, d_aaron_18@hotmail.com

Las arquitecturas metal-orgánicas son una nueva clase de materiales bidimensionales o tridimensionales con cavidades, que se caracterizan por estar formados por una parte inorgánica (clusters de metales de transición que forman los nodos de la red) y un componente orgánico (ácidos di o tricarbónicos) que enlazan a los nodos inorgánicos para formar redes porosas, el interés en este tipo de materiales se debe a que tienen aplicaciones como: tamices moleculares,¹ desecantes,² en intercambio de iones,³ en óptica no lineal,⁴ en catálisis heterogénea,⁵ y en biomedicina en el área de almacenamiento de fármacos.⁶ Debido a lo anterior en el grupo de investigación nos hemos interesado en realizar el estudio teórico del almacenamiento de los colorantes anaranjado G, anaranjado de metilo y rojo de metilo en el MOF-5 para determinar la orientación, número máximo de moléculas de colorante que es posible almacenar así como el tipo de interacciones que se dan entre el MOF-5 y los colorantes. Las especies resultantes del presente trabajo fueron optimizadas utilizando el funcional PBE0 para modelar la contribución de la energía de correlación e intercambio (E_{xc}) a la energía total, y una base de ondas planas (PP-PW) utilizando el programa Quantum Espresso 5.4.0.⁷

1. R. Matsuda, R. Kitaura, S. Kitagawa, Y. Kubota, R. V. Belosludov, T. C. Kobayashi, H. Sakamoto, T. Chiba, M. Takata, Y. Kawazoe, *Nature*, **2005**, 436, 238.
2. T. K. Maji, G. Mostafa, R. Matsuda, S. Kitagawa, *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, 127, 17152.
3. J. S. Seo, D. Whang, H. Lee, S. I. Jun, J. Oh, Y. J. Jeon, K. Kim, *Nature*, **2000**, 404, 982.
4. O. R. Evans, W. Lin, D. Braga, *Acc. Chem. Res.*, **2002**, 35, 511.
5. C-D. Wu, A. Hu, L. Zhang, W. Lin, *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, 127, 8940.
6. R. C. Huxford, J. D. Rocca, W. Lin, *Curr. Opin. Chem. Biol.*, **2010**, 14, 262.
7. P. Giannozzi, *J.Phys.:Condens.Matter*, 2009, 21, 395502.