

Estudio computacional de procesos de separación de gas natural en mofs.

E. García-Pérez,* A. Martín-Calvo y S. Calero
Departamento de Física, Química y Sistemas Naturales
Universidad Pablo de Olavide
Ctra Utrera km1. 41013 Sevilla

Los MOFs, estructuras metalorgánicas, son un material interesante para el estudio de procesos de adsorción debido a que son altamente cristalinos y su tamaño de poro varía en un amplio rango. Actualmente se investiga desde el punto de vista tecnológico y ambiental, tanto química como estructuralmente, ya que se utilizan en procesos de separación, catálisis y almacenamiento de gases. Nuestro trabajo está basado en procesos de adsorción, almacenamiento y por tanto de separación de los componentes mayoritarios del gas natural en dos tipos de MOFs: Cu-BTC e IRMOF-1. Hemos utilizado métodos avanzados de simulación molecular para estudiar dichos procesos. En primer lugar, es necesario diseñar correctamente el material, definiendo cada uno de los tipos de átomos y asignándoles cargas adecuadas, para ello se ha utilizado el programa Gaussian. En un segundo paso, definimos las interacciones moleculares, van der Waals y coulombicas. Las van der Waals mediante potenciales tipo Lennard-Jones y las coulombicas usando sumas de Ewald^{1,2}. El tercer paso, será definir buenos parámetros intermoleculares, para ello utilizamos métodos matemáticos de ajuste

a isothermas experimentales de adsorción³. Por último, estudiamos la adsorción y difusión molecular en estos materiales. La adsorción usando el colectivo GC⁴ y la difusión utilizando dinámica molecular clásica, o cuando esto es imposible, Teoría del Estado de Transición (TST)⁵.

Para validar los resultados obtenidos hemos comparado nuestros resultados de simulación con medidas experimentales disponibles. Posteriormente hemos estudiado el efecto que ejerce cada estructura (tipo de átomos y tamaño y forma de poros) en la separación de mezclas equimolares y en otras proporciones de CO₂/CH₄, CO₂/N₂, CH₄/C₂H₆/N₂/CO₂/C₃H₈ y de una mezcla de once componentes con proporciones que cumplen la de una muestra de gas natural.

* egarper@upo.es

¹ *J. Amer. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 11376.

² *Phys. Rev. Lett.* **2004**, *93*, 088302.

³ *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108*, 12301.

⁴ *J. Phys. Chem. B* **2006**, *110*, 3164.

⁵ *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 3623.