

## Estudios de procesos de adsorción y difusión molecular en materiales cristalinos utilizando simulación molecular

Sofia Calero\*

*Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales  
Universidad Pablo de Olavide  
Carretera de Utrera km1. 41013 Sevilla*

Utilizamos técnicas avanzadas de simulación molecular para estudiar adsorción, difusión y catálisis en materiales porosos cristalinos (zeolitas, aluminosilicatos, aluminofostatos, silicogermanatos, titanatos y MOFs). Para ello hemos recurrido al desarrollo de nuevos métodos de simulación, modelos y campos de fuerza<sup>1-5</sup>. La combinación de estos factores nos ha permitido reproducir de forma precisa los datos experimentales existentes, predecir adsorción y difusión molecular en nuevos sistemas, estudiar sus propiedades catalíticas y en resumen analizar cómo afectan a los fenómenos de adsorción y difusión molecular factores tales como la composición química de estructura, su forma, el tamaño y el tipo de poro y la densidad, distribución y tipo de cationes de intercambio, cuando éstos son necesarios para neutralizar la estructura.

\* scaldia@upo.es

<sup>1</sup> Calero, S.; Dubbeldam, D.; Krishna, R.; Smit, B.; Vlugt, T. J. H.; Denayer, J. F. M.; Martens, J. A.; Maesen, T. L. M. *J. Amer. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 11376.

<sup>2</sup> Dubbeldam, D.; Beerdsen, E.; Calero, S.; Smit, B. *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.* **2005**, *102*, 12317.

<sup>3</sup> Dubbeldam, D.; Calero, S.; Maesen, T. L. M.; Smit, B. *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *90*, 245901.

<sup>4</sup> Dubbeldam, D.; Calero, S.; Vlugt, T. J. H.; Krishna, R.; Maesen, T. L. M.; Beerdsen, E.; Smit, B. *Phys. Rev. Lett.* **2004**, *93*, 088302.

<sup>5</sup> García-Pérez, E.; Dubbeldam, D.; Liu, B.; Smit, B.; Calero, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, *46*, 276.

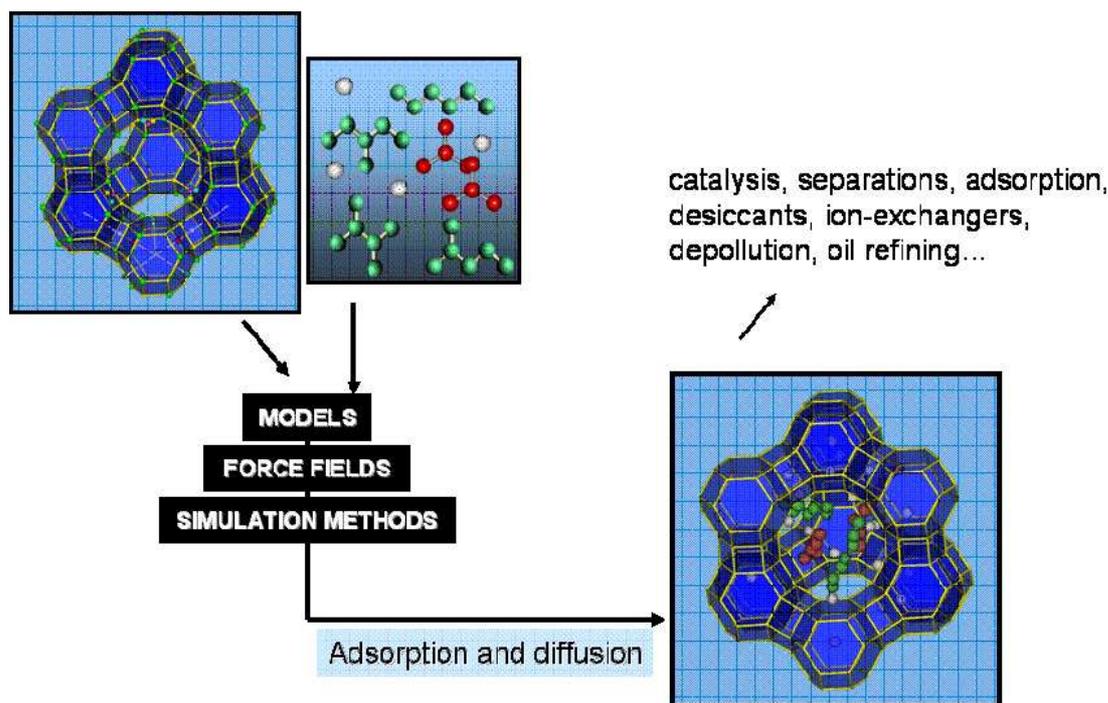


Figura 1.