

# Estudio del efecto de la temperatura, presión y tipo de catión sobre la estructura flexible de la zeolita RHO mediante técnicas de simulación molecular

S. Rodríguez-Gómez,\* J. J. Gutiérrez-Sevillano y S. Calero

*Departamento de Física, Química y Sistemas Naturales*

*Universidad Pablo de Olavide, Sevilla*

Las zeolitas son aluminosilicatos con poros y huecos de dimensiones moleculares. Estas estructuras no muestran grandes deformaciones y son conocidas por su rigidez. A pesar de ello, existen ciertas zeolitas que son particularmente flexibles como las estructuras BIK, SOD y RHO.<sup>1</sup> La zeolita RHO muestra deformaciones estructurales únicas y se han corroborado experimentalmente mediante deshidratación,<sup>2</sup> por las posiciones de los cationes, el tipo de catión y mediante cambios en las condiciones de presión—temperatura.<sup>3</sup> Estas deformaciones pueden verse en la FIG. 1.

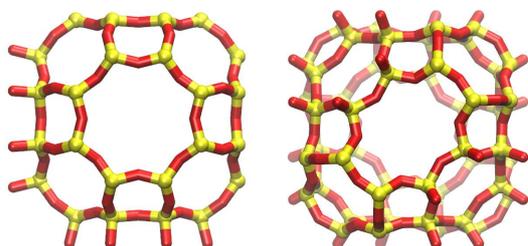


FIG. 1. Transición de fase estructural de la zeolita RHO.

Un estudio reciente muestra una selectividad altísima en la separación de dióxido de carbono y metano; inducida presumiblemente por las deformaciones estructurales durante la adsorción.<sup>4</sup>

Hemos usado avanzadas técnicas de simulación para reproducir el fenómeno completo: (1) el colectivo osmótico—mediante un método híbrido Monte Carlo/Dinámica Molecular— para la predicción de la adsorción de dióxido de carbono en la estructura flexible,<sup>5,9</sup> y (2) los efectos de la temperatura, presión, tipo de catión sobre estructura flexible son estudiados mediante Dinámica Molecular en el colectivo isoterma—isocono.

Todo esto ha sido posible mediante el desarrollo de un nuevo campo de fuerzas basado en una combinación de trabajos anteriormente validados: estructuras flexibles,<sup>6-8</sup> e interacciones en la adsorción de dióxido de carbono en zeolitas.<sup>10</sup> Este nuevo campo de fuerzas es capaz de reproducir el fenómeno completo.

---

\* salrodgom@gmail.com

<sup>1</sup> V. Kapko *et al.*, Phys. Chem. Phys., 2010, 12, 8531-8541

<sup>2</sup> J. B. Parise *et al.*, J. Chem. Phys., 1984, 88, 1635-1640

<sup>3</sup> D. R. Corbin *et al.*, J. Am. Chem. Soc. 1990, 112, 4821-4830

<sup>4</sup> M. Palomino *et al.*, Chem. Commun., 2012, 48, 215-217

<sup>5</sup> Ji Zang *et al.*, J. Chem. Phys., 2011, 134, 184103

<sup>6</sup> J. B. Nicholas *et al.*, J. Am. Chem. Soc., 1991, 113, 4792-4800

<sup>7</sup> J. R. Hill & J. Sauer, J. Phys. Chem, 1994, 98, 1238-1244

<sup>8</sup> J. R. Hill & J. Sauer, J. Phys. Chem, 1995, 99, 9536-9550

<sup>9</sup> Coudert *et al.*, J. Am. Chem. Soc., 2008, 130, 14294-14302

<sup>10</sup> A. García-Sánchez *et al.*, J. Phys. Chem. C, 2009, 113, 8814-8820