

Índice general

Agradecimientos	I
Dedicatoria	III
Resúmenes	V
Resumen	VII
Resum	IX
Summary	XI
1. Introducción	1
1.1. Zeolitas y su Papel en Procesos de Separación	3
1.2. Difusión: una Visión Fundamental	5
1.3. ¿Cual es el Papel de las Técnicas Computacionales?	8
1.4. Interrogantes	9
1.5. Estructura de la Tesis	11
2. Difusión: Fundamentos y Métodos Computacionales	13
2.1. Difusión: Fundamentos Teóricos	15
2.1.1. Dependencia con la Concentración	16
2.1.2. Dependencia con la Temperatura	18
2.1.3. Einstein y Movimiento Browniano	18
2.2. Mecánica Estadística	19
2.3. Dinámica Molecular	21
2.3.1. Ecuaciones de movimiento de Newton	22
2.3.2. Condiciones Periódicas de Frontera	24
3. Campos de Fuerza para el Estudio de Polimorfos Silíceos	27
3.1. Un Vistazo a la Literatura	29
3.2. Selección de los Campos de fuerza	30
3.3. Modelos de Polimorfos Silíceos	34

3.4.	Propiedades Calculadas	35
3.4.1.	Propiedades Estructurales	35
3.5.	Campos de Fuerza	38
3.5.1.	Términos Electrostáticos	38
3.5.2.	Términos Enlazantes	42
3.5.3.	Términos No-Enlazantes	43
4.	Difusión en Zeolitas: Influencia de la Flexibilidad de la Red	45
4.1.	Modelos	47
4.2.	Métodos	48
4.2.1.	Detalles de Cálculo	48
4.2.2.	Potencial Interatómico	49
4.3.	Resultados y Discusión	51
4.3.1.	Variación Estructural con la Temperatura	51
4.3.2.	Dinámica de las Ventanas	54
4.3.3.	Difusión	57
4.4.	Conclusiones	61
5.	Difusión de Hidrocarburos en Zeolitas	63
5.1.	Estructuras Seleccionadas	64
5.2.	Metodología	66
5.2.1.	Detalles de Cálculo	66
5.2.2.	Superficie de Energía Potencial	67
5.3.	Difusión en Zeolitas	68
5.3.1.	Dinámica en la Zeolita Si-LTA	68
5.3.2.	Dinámica en la Zeolita Si-IHW	73
5.3.3.	Dinámica en la Zeolita Si-ITE	77
5.3.4.	Comparación de las características difusivas en Si-LTA, Si-IHW y Si-ITE	79
5.4.	Conclusiones	80
6.	Rol de la Superficie en el Proceso de Adsorción de Metano en la Zeolita Si-LTA	83
6.1.	Modelo del Sistema	85
6.2.	Detalles de la Metodología de Cálculo	86
6.3.	Resistencia Superficial al Transporte de Masa	88
6.4.	Resultados y Discusión	89
6.4.1.	Zonas de Probabilidad de Ocupación y Energía Libre	90
6.4.2.	Permeabilidad Superficial	93
6.5.	Conclusiones	96

7. Conclusiones	99
A. Parámetros Estructurales, Mecánicos y Dieléctricos de Estructuras Seleccionadas	103
A.1. Cuarzo- α : Parámetros Calculados y Experimentales	104
A.2. Cuarzo- β : Parámetros Calculados y Experimentales	106
A.3. Coesita: Parámetros Calculados y Experimentales	108
A.4. Si-LTA: Parámetros Calculados y Experimentales	110
A.5. Zeolita SSZ-73: Parámetros Calculados y Experimentales	112
A.6. Si-CHA: Parámetros Calculados y Experimentales	114
A.7. ITQ-1: Parámetros Calculados y Experimentales	116
B. Lista de Artículos Publicados	119
B.1. Artículos que Hacen Parte de la Tesis	119
B.2. Artículos que no Hacen Parte de la Tesis	119
B.3. Artículos Publicados Durante M.Sc.	120
Bibliografía	121