

Resumen

Los métodos de química computacional se han empleado en el estudio de materiales de zeolita aplicados a procesos de separación. Se consideró un enfoque clásico, donde los campos de fuerza se seleccionaron durante los procedimientos de *benchmark* entre los modelos actualmente disponibles. Los resultados obtenidos han sido validados considerando datos experimentales y se mejoró la descripción de los modelos, cuando fue posible, mediante procedimientos de parametrización. Así, los mejores modelos describieron sistemas con diferentes grados de complejidad, que fueron simulados a través de los métodos de Dinámica Molecular y Monte Carlo. La difusión y la adsorción en los microporos (*bulk*) y en la superficie externa de las zeolitas se pueden entender a nivel molecular. Se calculó la energía de adsorción y también se descompuso su magnitud en las contribuciones electrostática y de van der Waals. Además, fue posible observar más de cerca las interacciones anfitrión–invitado e invitado–invitado durante las trayectorias simuladas.

Considerando la creciente demanda energética a nivel mundial, los biocombustibles se consideran una opción sostenible obtenida a partir de biomasa. Se han simulado con éxito los pasos del proceso experimental desarrollado por Denayer et al. para la recuperación de biobutanol a partir de una mezcla fermentada. Se modelaron los ciclos de adsorción y desorción en dos columnas zeolíticas con selectividad complementaria (tipo LTA y CHA), con sistemas de nanoláminas y considerando las principales características experimentales. Aunque las escalas de tiempo experimentales son inalcanzables para los recursos computacionales disponibles actualmente, los sistemas simulados pudieron capturar los fenómenos experimentales y fueron evaluados más a fondo a través del comportamiento microscópico de los sistemas.

Un estudio experimental y computacional señaló la STW sílice pura (Si-STW) como un candidato prometedor para la separación de alcanos lineales, monoramificados y diramificados. Se probaron los isómeros C5 a C7, y el material Si-STW superó la capacidad de adsorción y selectividad de MFI de sílice pura, especialmente hacia los isómeros diramificados con átomos de carbono cuaternarios. Se

calcularon las isotermas de adsorción, el calor de adsorción y el comportamiento de difusión de los hidrocarburos probados y se compararon con los resultados experimentales. Por lo tanto, las propiedades de adsorción de Si-STW pueden ser exploradas para su uso sobre el producto obtenido durante el proceso de hidromerización – que genera componentes de mayor octanaje para la mezcla de gasolina –, aumentando su número de octano.

La producción de 6-kestosa para uso industrial como prebiótico y azúcar de bajo índice glucémico depende de su separación de las moléculas de sacarosa. La separación de una mezcla acuosa equimolar, que contiene sacarosa y 6-kestosa, mediante membranas zeolíticas se ha investigado a través de simulaciones de Dinámica Molecular. Una selección considerando las 253 estructuras de zeolitas reportadas, señaló los tres candidatos más prometedores (AET, ETR y DON), al evaluar el efecto de exclusión por tamaño (adsorción de sacarosa y exclusión de 6-kestosa), la movilidad de ambos azúcares dentro de las estructuras (evaluados con modelos tipo *bulk*), y simulando su futura aplicación como sistemas de membranas. Entre los mejores candidatos, la zeolita DON presentó una selectividad significativa para las moléculas de sacarosa, con el mayor flujo y siendo factible como material de sílice pura, igualando la composición química simulada.