

Índice.

Agradecimientos.....	5
Resumen.....	7
1 Introducción.	21
1.1 Zeolitas.....	21
1.1.1 Historia.	21
1.1.2 Composición química.	26
1.1.3 Topología.....	26
1.1.3.1 Cavidades, canales y anillos.	27
1.1.3.2 Unidades de construcción.	30
Primarias.....	30
Secundarias.	30
Compuestas.	31
Teselas.....	31
1.1.4 Síntesis.....	32
1.1.5 Gel de síntesis y nucleación.	32
1.1.6 Centro ácido generado.	33
1.1.7 Efectos del pH.	34
1.2 Agentes directores de estructura.	34
1.2.1 Cationes orgánicos.	34
1.2.2 Cationes inorgánicos.	36
1.2.3 Eliminación del agente director de estructura (ADE).	37
1.3 Química sostenible, aplicaciones industriales e interés comercial.	37
1.3.1 Uso tradicional de las zeolitas.	37
1.3.2 Uso de las zeolitas para lograr un entorno sostenible.	40
1.3.3 Conversión de biomasa.	40
1.3.4 Celdas de combustible.	41
1.3.5 Almacenamiento de energía térmica.	41
1.3.6 Captura y conversión del CO ₂	42
1.3.7 Contaminación del aire.	42
1.3.8 Componentes orgánicos volátiles sin metano (VOCs).....	43
1.3.9 Purificación del agua.	43
1.3.10 Desalinización del agua.....	44
1.4 Química computacional.....	46
1.4.1 Potenciales interatómicos de clase I, 1 ^a generación.....	47
1.4.2 Potenciales interatómicos de clase II, 2 ^a generación.....	47

1.4.3	Potenciales interatómicos de clase III, 3 ^a generación.....	47
1.4.4	Métodos computacionales zeolita-ADE.	48
1.4.4.1	Potenciales interatómicos de interacción en zeolitas.	49
1.4.4.2	Potenciales interatómicos de interacción en estructuras metal-orgánicas.....	51
1.4.4.3	Potenciales interatómicos de estructuras orgánicas.	51
1.4.4.4	Potenciales interatómicos de interacción zeolita-ADE.	52
1.4.4.5	Algoritmos de optimización y minimización.....	54
1.4.4.6	Metodología empleada en la tesis.....	55
1.4.4.6.1	Metodología utilizada en el filtrado computacional del agente director de estructura para la síntesis de la zeolita ITE en puro sílice.	55
1.4.4.6.2	Procedimiento aplicado en la selectividad de zeolita usando un mismo ADE en medio hidróxido y fluoruro.	56
1.4.4.6.3	Disciplina empleada en el aluminio como director de estructura en la síntesis de zeolitas.	57
1.4.5	Conversión de estructuras existentes.....	57
1.4.6	Materiales diseñados mediante inteligencia artificial.	58
1.4.6.1	Zeolitas.....	58
1.4.6.2	Agente Director de Estructura (ADE).	61
1.4.7	Mecánica cuántica.	65
1.4.8	Mejoras en las plataformas de cálculo.....	66
1.4.8.1	Computación convencional.....	68
1.4.8.2	Computación cuántica.....	69
	Bibliografía.	71
2	Objetivos.....	95
3	Filtrado computacional de agente director de estructura para la síntesis en puro sílice de la zeolita ITE	97
3.1	Antecedentes.	98
3.2	Metodología.	98
3.3	Resultados.	102
3.4	Conclusión.	103
	Bibliografía.	104
4	Selectividad de zeolita usando un mismo agente director de estructura en medio hidróxido y fluoruro	107
4.1	Antecedentes.	108
4.2	Metodología.	110
4.2.1	Análisis.	111
4.2.2	Revisión bibliográfica.....	113
4.2.3	Localización del OSDA en las zeolitas.	115

4.3	Resultados.....	115
4.3.1	Discusión.....	120
4.4	Conclusión.....	124
	Bibliografía.....	125
5	El aluminio como director de estructura en la síntesis de zeolitas...	129
5.1	Antecedentes.....	130
5.2	Metodología.....	133
5.2.1	Detalles de la búsqueda de los ADEO.....	133
5.2.2	Energía de síntesis para zeolita de aluminosilicato.....	134
5.3	Resultados.....	136
5.4	Conclusión.....	138
	Bibliografía.....	138
6	Discusión general.....	143
7	Conclusión general.....	147
8	Anexos.....	149
8.1	Filtrado computacional de los ADE para la síntesis en puro sílice de la zeolita ITE.....	151
8.1.1	Detalles de cálculo.....	151
8.1.2	Información adicional de la Ilustración 3-4, de la publicación.	155
8.1.3	Comparación entre ITE y RTH.....	156
8.1.4	Geometrías optimizadas de ADE en la cavidad 'ite' perteneciente a la zeolita ITE.....	157
	Bibliografía.....	159
8.2	Selectividad de fase de la zeolita usando un mismo ADE en medio hidróxido y fluoruro.....	161
8.2.1	Zeolitas puro sílice y zeolitas con germanio.....	161
8.2.2	Detalles de métodos y modelos computacionales.....	170
8.2.3	Mayor detalle de los resultados computacionales.....	173
8.2.4	Comparación con trabajos recientes de la bibliografía.....	177
	Bibliografía.....	180
8.3	El aluminio como director de estructura en la síntesis de zeolitas. ...	183
8.3.1	Análisis energético de aluminosilicatos.....	183
8.3.2	Detalles de la simulación DFT periódica y análisis energético de las zeolitas de aluminosilicato con fluoruro utilizando DFT.....	186
8.3.3	Análisis de la distribución del aluminio.....	187
	Bibliografía.....	188