

Las zeolitas son un material de aluminosilicatos cristalinos microporosos extensivamente utilizados como catalizadores y tamices moleculares involucrados en procesos de separación. La mayoría de estos materiales son sintéticos, obtenidos en laboratorio mediante un proceso hidrotermal y barajando gran cantidad de variables como: relación sílice/agua, temperatura, tiempo; agitación y composición química. Cuando en la síntesis se introducen ciertas moléculas orgánicas, llamadas agentes directores de estructura, es más fácil entender y seleccionar moléculas específicas para dirigir la síntesis hacia una zeolita en particular. La situación ideal sería que cada agente director de estructura condujese la síntesis a una única zeolita, lo cual es poco probable que suceda, ya que, otros términos energéticos también juegan un papel importante, en particular el flúor y el aluminio.

En esta tesis doctoral será acometido el estudio de estos tres factores: agente director de estructura, flúor y aluminio, además de su papel en la síntesis de zeolitas desde un enfoque químico-computacional. Proponiendo agentes directores de estructura más precisos para la síntesis de zeolitas, siendo sintetizadas de manera alternativa y/o más sostenible.