
Esta tesis investiga los mecanismos microscópicos de la adsorción selectiva y difusión de etileno en zeolitas que contienen plata mediante una combinación de dispersión inelástica de neutrones (INS), dispersión cuasielástica de neutrones (QENS) y teoría funcional de densidad (DFT). Las zeolitas se han aplicado con éxito como materiales adsorbentes en varias separaciones desafiantes debido a sus propiedades físicas químicas notables y ajustables. Un uso particular está relacionado con la separación de alquenos de alcanos. Además de funcionar como tamices moleculares, la interacción selectiva del alqueno con los cationes de metales de transición ubicados en las cavidades de las zeolitas juega un papel crucial al mejorar la separación selectiva mediante un mecanismo conocido como complejación π . La energía de unión de la complejación π es intermedia entre una fisorción fuerte y una quimisorción débil, lo que permite una alta selectividad y regenerabilidad de las moléculas adsorbidas en el sitio del metal de transición. Aunque se han publicado varios estudios sobre la adsorción de etileno en zeolitas con Ag, la mayoría se basan en técnicas experimentales o en predicciones puramente teóricas que no describen completamente el sistema bajo investigación. Por lo tanto, la interacción del etileno con la plata y los factores que determinan este mecanismo de adsorción selectiva y la difusión del etileno adsorbido en zeolitas con Ag aún no se comprenden completamente. La combinación de enfoques teóricos (DFT) y experimentales (INS y QENS) para estudiar la complejación π de etileno en zeolitas de plata de poros pequeños CHA, RHO y LTA permite comprender las influencias de la geometría local de la estructura y entorno de los sitios Ag^+ en la formación y difusión de complejos π . Además, este método puede extenderse a investigaciones en muchos materiales similares (sean otras zeolitas o diferentes sistemas microporosos) como una herramienta para proporcionar información cualitativa y cuantitativa satisfactoria.