
ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	1
2. ZEOLITAS	5
2.1. Estructura	6
2.2. Propiedades y aplicaciones	10
2.3. Síntesis	13
2.3.1. Especies orgánicas como ADE	16
2.3.2. Especies inorgánicas como ADE	17
2.3.2.1. <i>Cationes alcalinos</i>	17
2.3.2.2. <i>Aniones fluoruro</i>	18
2.3.2.3. <i>Elementos T(III) y T(IV)</i>	19
2.4. Caracterización	20
<u>Bibliografía</u>	25
3 METODOLOGÍA	33
3.1 Mecánica Molecular	34
3.1.1 Formas funcionales de la energía potencial	34
3.1.1.1 <i>Interacciones entre dos cuerpos</i>	35
3.1.1.1.1 Interacciones de corto alcance	35
3.1.1.1.2 Interacciones de largo alcance	36
3.1.1.2 <i>Interacciones entre tres cuerpos</i>	37
3.1.1.3 <i>Interacciones entre cuatro cuerpos</i>	38

3.1.1.4 <i>Polarizabilidad</i>	38
3.1.2 Truncamiento de los potenciales	40
3.1.3 Parametrización	41
3.1.4 Potenciales utilizados	43
3.1.5 Cálculos	44
3.1.5.1 <i>Energía de red y geometría de equilibrio</i>	44
3.1.5.2 <i>Frecuencias vibracionales</i>	46
3.1.5.3 <i>Defectos</i>	47
3.2 Mecánica Cuántica	48
3.2.1 Formalismo de la Mecánica Cuántica	48
3.2.1.1 <i>Ecuación de Schrödinger</i>	48
3.2.1.2 <i>Aproximación de Born-Oppenheimer</i>	49
3.2.2 Aproximaciones electrónicas	51
3.2.2.1 <i>Hartree-Fock</i>	51
3.2.2.2 <i>Métodos Post Hartree-Fock</i>	53
3.2.2.2.1 <i>Métodos Variacionales</i>	53
3.2.2.2.2 <i>Métodos Perturbativos</i>	55
3.2.2.3 <i>Teoría del funcional de la densidad</i>	56
3.2.3 RMN	59
3.2.3.1 <i>Formalismo</i>	59
3.2.3.2 <i>Elección del campo vectorial</i>	61
<u>Bibliografía</u>	64
4. INTERACCIÓN ZEOLITA-ADE	67
4.1 Antecedentes Históricos	68

Índice	iii
4.2 Metodología	70
4.3 Resultados	75
4.3.1 Redes	75
4.3.1.1 <i>EUO</i>	75
4.3.1.2 <i>ITH</i>	76
4.3.1.3 <i>IWR</i>	77
4.3.1.4 <i>IWW</i>	77
4.3.2 ADEs	78
4.3.3 Sistema red-ADE	79
4.3.3.1 <i>Pentametonio</i>	83
4.3.3.2 <i>Hexametonio</i>	91
4.3.3.3 <i>Heptametonio</i>	94
4.3.3.4 <i>Octametonio</i>	96
4.3.4 Efecto de elongación de la cadena	98
<u>Bibliografía</u>	103
5. PAPEL DEL GE COMO ADE EN LA SÍNTESIS DE Si,Ge-ZEOLITAS	107
5.1. Antecedentes Históricos	108
5.2. Metodología	111
5.2.1. Energía de sustitución Si → Ge	111
5.2.2. Energía de formación de las Si,Ge-zeolitas	113
5.3. Resultados	115
5.3.1. Substitución isomórfica Si → Ge	115
5.3.1.1. <i>Dependencia de la geometría inicial</i>	127

5.3.1.2. <i>Dependencia de la geometría final</i>	129
5.3.2. Localización preferencial del Ge en las unidades D4R	132
5.3.3. Estabilidad termodinámica de las Si,Ge-zeolitas	136
<u>Bibliografía</u>	142
6. LOCALIZACIÓN Y PAPEL DEL ANIÓN FLUORURO EN LAS SI,F-ZEOLITAS	145
6.1. Antecedentes Históricos	146
6.2. Metodología	150
6.2.1. Potenciales interatómicos	151
6.2.2. Modelos	152
6.2.2.1. <i>Celdas unidad</i>	152
6.2.2.2. <i>Cajas</i>	155
6.2.3. Distribuciones y propiedades energéticas del anión F ⁻	157
6.3. Resultados	160
6.3.1. Incorporación del anión F ⁻ a la red zeolítica como defecto puntual	161
6.3.1.1. <i>Estructura ITH</i>	161
6.3.1.2. <i>Estructura STT</i>	164
6.3.1.3. <i>Estructura IFR</i>	165
6.3.1.4. <i>Estructura STF</i>	166
6.3.2. Distribución espacial del anión F ⁻ en las Si-zeolitas	168
6.3.2.1. <i>Estructura ITH</i>	168

Índice	v
6.3.2.2. Estructura STT	171
6.3.2.3. Estructura IFR	172
6.3.2.4. Estructura STF	174
6.3.3. Entorno próximo del anión F ⁻ en las Si-zeolitas	177
6.3.4. Aplicación: Distribución del anión F ⁻ en la estructura IWR	181
<u>Bibliografía</u>	185
7. ESTUDIO COMPUTACIONAL DEL ESPECTRO DE RMN DE ¹⁹ F EN LAS SI, GE,F-ZEOLITAS CON UNIDADES D4R	189
7.1. Antecedentes históricos	190
7.2. Metodología	192
7.2.1. Potenciales interatómicos	192
7.2.2. Métodos de primeros principios	194
7.2.3. Modelos	195
7.3. Resultados	198
7.3.1. Geometría obtenida mediante potenciales interatómicos	198
7.3.2. Cálculo de los desplazamientos químicos de RMN de ¹⁹ F	203
7.3.2.1. Unidades 8Si0Ge- y 0Si8Ge-D4R	203
7.3.2.2. Unidades Si,Ge-D4R	208
7.3.3. Espectro de RMN de ¹⁹ F en las Si,Ge-zeolitas	213
<u>Bibliografía</u>	216
8. CONCLUSIONES	219