

Simulación molecular de la adsorción de hidrocarburos en zeolitas con cationes de intercambio



Sofía Calero

Departamento de Ciencias
Ambientales. Universidad Pablo
Olavide - Sevilla
scaldia@upo.es

Resumen: Hemos utilizado técnicas avanzadas de simulación molecular para analizar la influencia de los cationes de intercambio sobre la adsorción de hidrocarburos en zeolitas. Para ello ha sido necesario desarrollar técnicas de simulación eficaces, modelos realistas para zeolitas e hidrocarburos y nuevos campos de fuerza que proporcionan las interacciones entre los distintos átomos. La combinación de estos factores ha permitido reproducir con precisión los datos experimentales existentes, predecir la adsorción de hidrocarburos en nuevos sistemas y finalmente analizar la influencia que el tipo de estructura y la densidad, distribución y tipo de catión de intercambio ejerce sobre la adsorción en zeolitas.