



SEPARACION DE MEZCLAS EQUIMOLARES DE HIDROGENO Y METANO EN MATERIALES METAL-ORGANICOS (MOF's) UTILIZANDO SIMULACION MOLECULAR

Marco Gallo¹, L. E. Serrato Villegas ¹, Daniel Glossman-Mitnik²

¹ Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila., Blvd. Venustiano Carranza s/n, Saltillo, Coahuila., 25280, México, marco_gallo2607@yahoo.com; Tel:844-416-9213.

² Grupo NANOCOSMOS and PRINATEC, Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C., Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial Chihuahua, Chihuahua, Chih., 31109, México

RESUMEN

En este trabajo mediante técnicas de Simulación Molecular Grand Canonical Monte Carlo (GCMC) calculamos las isothermas de adsorción para componentes puros y mezclas binarias de hidrogeno-metano en dos MOFs (MOF-5 y MOF-177) de gran área superficial, dos MOFs catenados (IRMOF-11 y MOF-14) y en un MOF con fuertes dipolos $\text{Zn}^{\delta+} - \text{O}^{\delta-}$ en la superficie (MOF-74) que genera fuertes atracciones energéticas con los adsorbentes. Las isothermas de adsorción se calcularon a 298 K y hasta presiones de 80 bar. Los resultados de este trabajo indican una separación exitosa en estos materiales con selectividades a baja presión en el orden de 25 para MOF-74, 20 para IRMOF-11 y 18 para MOF-14, comparados con bajos valores de selectividad en el orden de 5 para MOF-5 y MOF-177 [1].

Palabras clave: catenación, MOF's, Grand Canonical Monte Carlo, Simulación Molecular

1. Fuel Gas Storage and Separations by Metal-Organic Frameworks: Simulated Adsorption Isotherms for H_2 , CH_4 and their Equimolar Mixture, Marco Gallo and Daniel Glossman-Mitnik, **Journal of Physical Chemistry C** (2009), 113(16), 6634-6642