



Instituto **Tecnológico**[®]
de Aguascalientes

INSTITUTO TECNOLÓGICO DE AGUASCALIENTES

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y BIOQUÍMICA

**“REMOCIÓN DE CO₂ USANDO ESTRUCTURAS METAL
ORGÁNICAS IMPREGNADOS DE LÍQUIDOS IÓNICOS”**

PRESENTA

EDUARDO ROMÁN FLORES VÁZQUEZ

DIRECTORA DE TESIS

DRA. FLORIANNE CASTILLO BORJA

**TESIS PRESENTADA AL DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA
QUÍMICA COMO REQUISITO PARA OBTENER EL GRADO DE:**

INGENIERO QUÍMICO

AGUASCALIENTES, AGS

MARZO DE 2025



Educación
Secretaría de Educación Pública



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO



Instituto Tecnológico de Aguascalientes
División de Estudios Profesionales

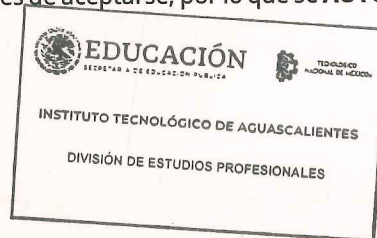
Aguascalientes, Ags., 29/agosto/2025

Oficio No. 008/2025

Asunto: Autorización de Trabajo Profesional
para su impresión

C. EDUARDO ROMÁN FLORES VÁZQUEZ
EGRESADO DE INGENIERÍA QUÍMICA

Los abajo firmantes, miembros del Jurado para el Examen Profesional, hacemos constar que, habiendo revisado el Trabajo Profesional desarrollado por Ud. bajo el título de **"REMOCIÓN DE CO₂ USANDO ESTRUCTURAS METAL ORGÁNICAS IMPREGNADO DE LÍQUIDOS IÓNICOS"** hemos dictaminado que es de aceptarse, por lo que se **AUTORIZA SU IMPRESIÓN.**



ATENTAMENTE

*Excelencia en Educación Tecnológica®
Ingenio, Cultura y Saber, que conducen a la Excelencia®*

DRA. FLORIANNE CASTILLO BORJA
PRESIDENTE

DR. ULISES IVÁN BRAVO SÁNCHEZ
SECRETARIO

DRA. VIRGINIA HERNÁNDEZ MONTOYA
VOCAL



2025
Año de
**La Mujer
Indígena**

Av. Adolfo López Mateos #1801. Fracc. Bona Gens
C.P. 20256 Aguascalientes, Ags. Tel. 449 910 5002 ext. 105
e-mail: profesional@aguascalientes.tecnm.mx
tecnm.mx | www.aguascalientes.tecnm.mx



Instituto Tecnológico
de Aguascalientes



ABET

AGRADECIMIENTOS

Ingeniería Química es una carrera sumamente interesante, después de cuatro años y medio durante el transcurso de esta no puedo decir que sea la misma persona que cuando comencé. La carrera me respondió muchas preguntas sobre el funcionamiento del mundo, mi perspectiva creció como en ninguna otra de mis etapas académicas. Cambió mi forma de pensar y de aproximarme al mundo, ahora no paro de notar los fenómenos de transporte en un auto, en una computadora, en una cocina o en las tuberías de mi casa; cuando tomo un medicamento pienso en las operaciones unitarias durante su fabricación que permitieron la existencia de esa sustancia en mi mano. Sin duda alguna, esta es una carrera que cambió mi mente y me permitió entender más allá de lo que me permiten mis sentidos; es sumamente bella.

Y, sin embargo, la razón de que esté aquí después de estos años se lo debo a mis padres; porque ellos son personas a los que la vida no les permitió estudiar una profesión por mucho que hubieran querido y a pesar de ello se han esforzado y sacrificado como nadie para que yo tuviera las oportunidades que ellos nunca tuvieron.

Se lo debo a mis amigos Marco, Axel y Yahir a quienes conozco desde que era un niño y con quienes he crecido física y mentalmente, porque en todos esos años que los he conocido aprendí lo que significa ser una buena persona. Han estado conmigo en mis altibajos y no creo que exista alguien con personas tan excepcionales entre sus amigos como yo, de quienes estoy muy orgulloso.

Se lo debo a mi pareja Linda, porque en su compañía es que tomo ánimos a seguir esforzándome en mejorar cada etapa de mi vida, por su apoyo incondicional y porque tenerla como mi pareja me hace sentir paz y mucha felicidad.

Por último, se lo debo a los docentes del ITA quiénes me han heredado muchos de sus conocimientos con gran pasión. Especialmente a la Dra. Florianne por haberme enseñado tantas cosas estos meses, por su paciencia, por haberme hecho crecer académicamente y porque además de ser una docente excelente también es una persona muy cálida.

“Si he llegado a ver más lejos que otros es porque me subí a hombros de gigantes” (Newton, 1675).

RESUMEN

Se estudió la adsorción del dióxido de carbono (CO_2) sobre los poros de la estructura metal-orgánica (MOF) zeolítica imidazol 8 (ZIF-8) impregnada de los líquidos iónicos Emim- BF_4 y Bmim- NTf_2 . El objetivo fue medir el cambio en la cantidad de moles de gas adsorbidos teniendo como referencia la adsorción del CO_2 únicamente usando ZIF-8.

El proyecto se llevó a cabo con la ayuda del simulador *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS). Se hizo uso de la Dinámica Molecular y el Grand Canonical Monte Carlo de acuerdo con los campos de fuerza de cada sustancia para construir isothermas de adsorción en un rango de baja presión ($P \leq 3 \text{ atm}$) a 298.15K ajustada posteriormente con la isoterma de Freundlich para extender el rango de presión. Además, se varió la cantidad de líquido iónico en la zeolita con tres y siete moléculas de cada líquido por cada ocho celdas unitarias de ZIF-8.

Los principales resultados muestran que ambos líquidos iónicos mejoran la cantidad de gas CO_2 adsorbido, mostrando hasta un 60% de mejora promedio en el caso más prometedor (tres moléculas de Emim- BF_4) y un 16.4% en el caso menos favorecido (siete moléculas de Bmim- NTf_2). En particular se observa que los factores de mayor importancia en los casos de estudio fueron tanto el tamaño de la molécula de líquido iónico, como la cantidad usada. Los resultados muestran una disminución consistente en la adsorción mientras los poros del ZIF-8 estén más saturados ya sea por una molécula muy grande de líquido iónico, o en su defecto, una mayor cantidad de este.

TABLA DE CONTENIDOS

Agradecimientos	1
Resumen	2
1 Introducción	6
2 Objetivos	8
3 Justificación.....	9
4 Marco Teórico	10
4.1 Estructuras Metal-Orgánicas (MOF) y el ZIF-8.....	10
4.2 Propiedades de los ZIFs.....	10
4.3 Dióxido de carbono	12
4.4 Líquidos iónicos	12
4.5 Isotermas de adsorción	13
4.5.1 Isoterma de Langmuir.....	15
4.5.2 Isoterma de Freundlich	17
4.5.3 Cantidad absoluta y cantidad de exceso de moles adsorbidos	18
4.6 <i>Simulador Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator</i> (LAMMPS) y algunas características	20
4.6.1 Potenciales	20
4.6.2 Radio de Corte	20
4.7 Modelos matemáticos	23
5 Desarrollo	28
6 Resultados	37
7 Conclusiones	42
8 Fuentes de información	43
9 Anexos.....	45

índice de tablas

Tabla 5.1. Parámetros de Lennard-Jones del CO ₂	30
Tabla 5.2. Cargas parciales, distancia y enlace de ángulo del CO ₂	29
Tabla 5.3. Comparativa de densidades del CO ₂	30
Tabla 5.4. Potencial de enlace para el ZIF-8	32
Tabla 5.5. Potencial de ángulo para el ZIF-8	31
Tabla 5.6. Potencial de diedro para el ZIF-8	32
Tabla 5.7. Potencial del ángulo impropio.....	31
Tabla 5.8. Potencial de Lennard-Jones y cargas parciales para el ZIF-8	32
Tabla 5.9. Comparativa de moles adsorbidos en ZIF-8 Hwang et al., 2022 vs simulado en este proyecto	33
Tabla 5.10. Comparativa de densidades simuladas vs experimentales Bmim-NTf ₂ a 298.15K (Hamidova et al., 2015).	35
Tabla 5.11. Comparativa de densidades simuladas vs experimentales Emim-BF ₄ a 298.15K y 1 atm (Doherty et al., 2017).....	36
Tabla 6.1. Adsorción simulada de CO ₂ en ZIF-8 impregnado con Emim-BF ₄	37
Tabla 6.2. Adsorción simulada de CO ₂ en ZIF-8 impregnado con Bmim-NTf ₂	38
Tabla 6.3. Adsorción de CO ₂ en ZIF-8 impregnado con Emim-BF ₄ ajustada con la isoterma de Freundlich	38
Tabla 6.4. Adsorción de CO ₂ en ZIF-8 impregnado con Bmim-NTf ₂ ajustada con la isoterma de Freundlich.	39
Tabla 6.5. Mejora porcentual promedio en cada caso de simulación.....	40

índice de ilustraciones

Ilustración 4.1. Estructura molecular del ZIF-8	11
Ilustración 4.2. Estructura molecular del CO ₂	12
Ilustración 4.3. Ejemplo de isoterma de Langmuir	17
Ilustración 4.4. Ejemplo de isoterma de Freundlich.....	18
Ilustración 4.5. Volumen ocupable (área verde) y área superficial accesible (líneas azules)	19
Ilustración 4.6. Ejemplo de volumen no accesible.	19
Ilustración 4.7. Visualización del radio de corte.	21
Ilustración 4.8. Visualización de PBC en una sola dirección.	23
Ilustración 4.9. Interpretación física de los potenciales.....	26
Ilustración 4.10. Potencial de Lennard-Jones.	27
Ilustración 5.1. Etapas del proyecto.	28
Ilustración 5.2. Densidad del CO ₂ simulada vs bibliografía.....	30
Ilustración 5.3. Tamaño de rejilla para dos celdas unitarias de ZIF-8.....	32
Ilustración 5.5. Adsorción simulada comparada con la adsorción reportada en Hwang et al., 2022	34
Ilustración 5.6. Comparativa de adsorción experimental vs ajustes con Langmuir y Freundlich.	34

Ilustración 5.7. Comparativa de densidades simuladas vs experimentales Bmim-NTf ₂ (Hamidova et al., 2015).	35
Ilustración 6.1. Comparativa de adsorción simulada usando Emim-BF ₄	37
Ilustración 6.2. Comparativa de adsorción simulada usando Bmim-NTf ₂	38
Ilustración 6.3. Comparativa de adsorción usando Emim-BF ₄ con datos ajustados.	39
Ilustración 6.4. Comparativa de adsorción usando Bmim-NTf ₂ con datos ajustados.	40
Ilustración 6.5. Mejora porcentual con uso de líquidos iónicos vs sin líquido iónico.....	41

1 INTRODUCCIÓN

El ambiente se define como el conjunto de componentes bióticos, abióticos y socioeconómicos que coexisten en un espacio determinado y con los cuales el ser humano interactúa, adaptándolos o modificándolos para satisfacer sus necesidades. Bajo esta perspectiva, la contaminación ambiental puede entenderse como cualquier alteración nociva, ya sea química, física, biológica o energética, que afecta al ambiente. Este fenómeno puede tener tanto causas naturales como antrópicas y manifestarse en diferentes medios como el agua, el suelo y, especialmente, el aire (Romero Placeres et al., 2006).

En lo que respecta a la contaminación del aire, se trata de una problemática que, aunque natural en algunos casos, ha sido profundamente influenciada por la actividad humana desde los albores de la civilización. Incluso desde el descubrimiento del fuego como herramienta, las actividades humanas han emitido partículas y gases que alteran la calidad del aire. Sin embargo, la escala de estas alteraciones aumentó drásticamente con la Revolución Industrial en Europa, un periodo que marcó un cambio paradigmático en la historia del desarrollo humano. Durante los siglos XVIII y XIX, la quema de combustibles como madera y carbón se convirtió en la base energética de las nacientes industrias y ciudades.

El crecimiento exponencial de la industria, combinado con una falta de conocimiento y preocupación por las consecuencias ambientales, dio lugar a niveles sin precedentes de contaminación atmosférica. Este fenómeno no solo afectó la salud de las personas que vivían en estas zonas industriales, sino que también estableció un patrón de dependencia energética que persiste hasta nuestros días.

Hoy en día, los combustibles fósiles (petróleo, carbón y gas natural) siguen siendo la principal fuente de energía a nivel mundial. Su quema genera una variedad de contaminantes, entre los que destacan materiales particulados (PM10 y PM2.5), monóxido de carbono (CO) y óxidos de nitrógeno (NOx), todos ellos con graves consecuencias para la salud humana (Romero Placeres et al., 2006). Sin embargo, los gases de efecto invernadero, como el dióxido de carbono (CO₂), el metano (CH₄) y el óxido nitroso (N₂O), representan una amenaza adicional, ya que contribuyen al calentamiento global y al cambio climático.

El dióxido de carbono, en particular, es el principal responsable del efecto invernadero antropogénico. Aunque forma parte del ciclo natural del carbono, las actividades humanas han desbalanceado este ciclo al liberar grandes cantidades de CO₂ a la atmósfera. Desde la Revolución Industrial, las concentraciones atmosféricas de este gas han aumentado de aproximadamente 280 ppm a más de 420 ppm en la actualidad. Este incremento ha intensificado el efecto invernadero, atrapando más calor en la atmósfera y generando consecuencias como el derretimiento de glaciares, el aumento del nivel del mar y fenómenos meteorológicos extremos.

A pesar de los avances tecnológicos y las iniciativas globales para promover energías renovables, la transición hacia una economía baja en carbono enfrenta numerosos desafíos. En este contexto, estudiar alternativas para capturar y mitigar las emisiones de dióxido de carbono, como el uso de materiales avanzados para su adsorción, es una línea de investigación crucial para abordar esta problemática ambiental.

2 OBJETIVOS

Objetivo General

- Evaluar la capacidad de adsorción de dióxido de carbono (CO_2) mediante la combinación del material ZIF-8 y líquidos iónicos, determinando si existe una mejora significativa en el proceso de captura en comparación con el uso individual de estos materiales.

Objetivos Específicos

- Corroborar campos de fuerza: Validar los parámetros de los campos de fuerza utilizados en simulaciones moleculares, asegurando su coherencia con los valores reportados en la bibliografía para el ZIF-8, los líquidos iónicos y sus interacciones con el CO_2 .
- Reproducir isothermas de adsorción: Replicar las isothermas de adsorción de CO_2 sobre el ZIF-8.
- Diseñar un sistema híbrido: Configurar un modelo de simulación que combine ZIF-8 con líquidos iónicos, considerando las interacciones específicas entre ambos materiales y el CO_2 .
- Evaluar la sinergia del sistema: Simular el comportamiento del sistema híbrido ZIF-8/líquidos iónicos frente al CO_2 para determinar si la combinación mejora la capacidad de adsorción en comparación con los componentes individuales.

3 JUSTIFICACIÓN

La captura de dióxido de carbono (CO_2) es un tema de interés global, especialmente debido a su papel en el cambio climático y el calentamiento global. Como se discutió previamente, el CO_2 es el principal gas de efecto invernadero generado por actividades humanas, y su acumulación en la atmósfera ha alcanzado niveles alarmantes. Ante esta problemática, se han explorado diversas estrategias para mitigar las emisiones, destacando entre ellas los procesos de captura y almacenamiento de carbono.

En este contexto, las membranas elaboradas con materiales porosos han surgido como una alternativa para la separación y captura de CO_2 . Materiales como los nanotubos de carbono, los óxidos de grafeno y las estructuras metal-orgánicas (MOFs) han demostrado alta eficiencia, facilidad de operación y un impacto ambiental reducido en comparación con métodos tradicionales. Estas membranas aprovechan las propiedades físicas y químicas del material para discriminar selectivamente entre moléculas, logrando una separación efectiva del dióxido de carbono.

Un enfoque innovador para aumentar la capacidad de adsorción de CO_2 en estas membranas es la incorporación de líquidos iónicos. Estos son diseñados específicamente como solventes con alta afinidad hacia el CO_2 , mejorando significativamente la adsorción. La combinación de un material poroso, como el ZIF-8 (un tipo de MOF), con líquidos iónicos puede ofrecer una mejor solución para la captura de CO_2 , integrando la alta selectividad del material poroso con las propiedades únicas de los líquidos iónicos.

Sin embargo, los estudios experimentales, aunque esenciales, pueden ser costosos y demandar mucho tiempo, especialmente cuando se trabaja con materiales avanzados como los líquidos iónicos y las membranas porosas. Para abordar este problema, el uso de simulaciones computacionales ha emergido como una alternativa poderosa. Técnicas como la Dinámica Molecular y los métodos de Monte Carlo permiten explorar la interacción entre el CO_2 , los líquidos iónicos y las matrices porosas a nivel molecular, proporcionando una gran cantidad de detalles sobre la eficiencia de adsorción de forma muy aproximada a lo reportado en los ensayos experimentales.

4 MARCO TEÓRICO

4.1 ESTRUCTURAS METAL-ORGÁNICAS (MOF) Y EL ZIF-8

Las estructuras metal-orgánicas (MOFs, por sus siglas en inglés) son nanomateriales formados por redes cristalina compuestas de nodos metálicos y ligantes orgánicos. En estas estructuras, los iones metálicos o clústeres actúan como nodos, mientras que los ligantes orgánicos funcionan como puentes que conectan dichos nodos, formando arreglos bidimensionales o tridimensionales. Este diseño permite la formación de cavidades internas conocidas como poros, con diámetros uniformes que son fundamentales para muchas de sus aplicaciones (Villegas-Fernández et al., 2021).

Una de las características más destacadas de los MOFs es su alta porosidad y su gran área superficial específica, que puede superar los 7000 m²/g, valores significativamente mayores a los de materiales tradicionales como el carbón activado. Además, los MOFs tienen una alta proporción de espacio vacío dentro de su estructura, con volúmenes de poros que representan entre el 55 % y el 90 % del total del material. Esto se combina con su baja densidad y su estabilidad química y térmica (Silva Reynoso Yosirine Quetzalli, 2016).

Otra ventaja clave de los MOFs es su versatilidad. Sus propiedades físicas y químicas, como el tamaño de los poros, la forma de las cavidades y la disposición de los enlaces, pueden ajustarse durante la síntesis. Esta capacidad de diseño controlado los hace muy atractivos para aplicaciones como el almacenamiento de gases, la separación y purificación de compuestos, la administración de fármacos y la catálisis heterogénea.

Dentro de la amplia variedad de MOFs, destaca una categoría conocida como estructuras zeolíticas de imidazolato o ZIFs (Zeolitic Imidazolate Frameworks). Estas estructuras combinan las propiedades de los MOFs con las características de las zeolitas, materiales sólidos cristalinos micro porosos que tradicionalmente se utilizan como tamices moleculares debido a su selectividad y capacidad de separación.

4.2 PROPIEDADES DE LOS ZIFs

Los ZIFs se componen de nodos metálicos, como Zn²⁺ o Co²⁺, coordinados con ligantes de imidazol a través de átomos de nitrógeno. Su topología es similar a la de las zeolitas, lo que

les permite poseer cavidades internas y tamaños de poro controlados. Sin embargo, a diferencia de las zeolitas, los ZIFs ofrecen una mayor versatilidad estructural gracias a las posibilidades de funcionalización de los ligantes de imidazol, lo que les permite formar una amplia gama de topologías adaptadas a necesidades específicas. Además, los ZIFs presentan una mayor estabilidad química y térmica, siendo capaces de mantener su estructura y funcionalidad en condiciones extremas de temperatura y en presencia de solventes agresivos o soluciones alcalinas (Silva Reynoso Yosirine Quetzalli, 2016).

El ZIF-8 es uno de los ZIFs más estudiados debido a su excelente estabilidad y propiedades únicas. Su composición molecular puede describirse como $\text{Zn}(\text{2-metilimidazol})_2$, con una topología cristalina tipo sodalita. Posee cavidades internas con un diámetro de 1.16 nm y aperturas de poro de 0.34 nm, lo que permite la discriminación selectiva de moléculas basándose en su tamaño. El área superficial específica del ZIF-8 es de aproximadamente $1810 \text{ m}^2/\text{g}$, con un volumen de poro de $0.508 \text{ cm}^3/\text{g}$ (Silva Reynoso Yosirine Quetzalli, 2016). En particular, el ZIF-8 no es tóxico para el humano, su síntesis es en realidad sencilla (Ramírez Ortega et al., 2018) presenta una alta adsorción de CO_2 en comparación con las demás zeolitas de imidazol (Battisti et al., 2011); en conjunto, estas características lo vuelven un buen candidato para profundizar el estudio de adsorción de CO_2 en conjunto con líquidos iónicos.

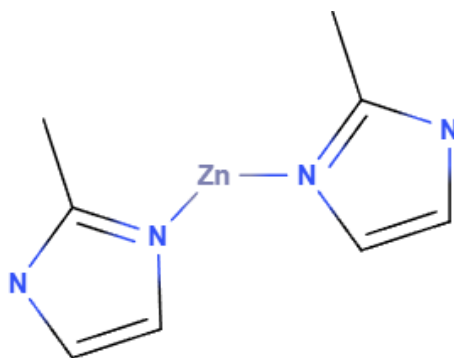


Ilustración 4.1. Estructura molecular del ZIF-8

4.3 DIÓXIDO DE CARBONO

El dióxido de carbono (CO_2) es una molécula química sencilla, compuesta por un átomo de carbono central unido de manera covalente a dos átomos de oxígeno. La disposición de sus átomos es lineal, con un ángulo de enlace de 180° . Cada enlace carbono-oxígeno es un enlace covalente doble, lo que implica un alto grado de estabilidad química y una longitud de enlace relativamente corta (Energy Institute, 2010).

Dado que el oxígeno es considerablemente más electronegativo que el carbono, los enlaces $\text{C}=\text{O}$ presentan polos parcialmente cargados, con una densidad electrónica mayor hacia los átomos de oxígeno. Sin embargo, debido a la geometría lineal y simétrica de la molécula, los momentos dipolares de los dos enlaces se anulan entre sí. Como resultado, el CO_2 es una molécula no polar a pesar de los enlaces individuales polares (Energy Institute, 2010).



Ilustración 4.2. Estructura molecular del CO_2

4.4 LÍQUIDOS IÓNICOS

La definición de los líquidos iónicos (IL) puede variar un poco dependiendo de la referencia, pero en general son sales líquidas a temperaturas inferiores a 100°C , con propiedades que los convierten en solventes de sustancias polares y muestran miscibilidad parcial en hidrocarburos aromáticos (Hamidova et al., 2015). Estas sustancias poseen baja presión de vapor, alta estabilidad térmica, no inflamabilidad, y en conjunto estas propiedades los convierten en sustancias útiles dentro de la catálisis por ejemplo (Enrico Bodo & Valentina Migliorati, 2011).

Están constituidas por un componente orgánico y uno inorgánico y en conjunto forman un catión y anión. Comparados con las sales inorgánicas comunes, las cuales son sólidas a temperatura ambiente y tienen altos puntos de fusión, los líquidos iónicos pueden encontrarse en ese estado a temperatura ambiente debido a sus bajos puntos de fusión y siendo los

cationes más comunes imidazol, piridinio y amonio, mientras que los aniones incluyen tetrafluoroborato (BF_4^-), hexafluorofosfato (PF_6^-) y bis(trifluorometilsulfonil)imida (NTf_2^-), entre otros. Esta diversidad permite ajustar sus propiedades físicas y químicas para aplicaciones específicas (Enrico Bodo & Valentina Migliorati, 2011).

El líquido iónico 1-butil-3-metilimidazolio bis(trifluorometilsulfonil)imida ($[\text{BMIM}][\text{NTf}_2]$) ha sido ampliamente estudiado por sus propiedades termofísicas y aplicaciones en procesos de captura de carbono y almacenamiento de energía. Sus propiedades, como densidad, compresibilidad isotérmica y capacidad calorífica, han sido medidas a altas presiones y temperaturas (Hamidova et al., 2015). Por otro lado, simulaciones de Dinámica Molecular muestran que este líquido iónico facilita la captura de CO_2 con gran selectividad comparada con otros gases como el N_2 , H_2 u O_2 . Esto debido a su alta solubilidad y propiedades de transporte mejoradas, formando una capa densa en su interfase sin alterar significativamente su estructura (Perez-Blanco & Maginn, 2010).

4.5 ISOTERMAS DE ADSORCIÓN

En fisicoquímica, el objeto de estudio es mayoritariamente los sistemas termodinámicos constituidos por diversas sustancias químicas en mezclas homogéneas. Con esto se entiende que al analizar de forma microscópica el sistema, cada partícula tiene más o menos el mismo entorno físico y las propiedades termodinámicas son iguales en el seno del sistema (Ira N. Levine, 2014).

Sin embargo, no todos los sistemas fisicoquímicos de interés están integrados de forma homogénea o sobre la misma fase, sino separados por una región pequeña de un par de diámetros moleculares donde se divisan las fases del sistema. Esta región física se denomina interfase y en esta región, el entorno microscópico es claramente diferente comparado al entorno del seno de ambas fases. Generalmente este entorno tiene aportaciones insignificantes en el estudio del sistema, pero existen situaciones, como catálisis, la absorción y la adsorción (Ira N. Levine, 2014).

Hablando específicamente de la adsorción, este es un fenómeno mediante el cual, una sustancia llamada adsorbato es adherida a la superficie de un sólido llamado adsorbente. Este

proceso de adsorción puede darse debido a las interacciones de Van der Waals relativamente débiles, y es llamado fisisorción; también puede darse siguiendo una reacción química mediante la cual, el adsorbato reacciona químicamente con la superficie del adsorbente y queda fijada mediante enlaces químicos. Otra diferencia importante sobre estos dos tipos de adsorción es que la quimisorción es altamente específica en comparación con la fisisorción, por ejemplo, para que el gas nitrógeno sea adsorbido por un adsorbente, basta con que la temperatura sea lo suficientemente baja; pero a temperatura ambiente, este mismo gas queda quimisorbido sobre Fe, Ca o Ti pero no sobre Ni, Ag, Cu o Pb (Ira N. Levine, 2014).

Siguiendo esta línea, la adsorción se sitúa en la superficie que recubre el sólido formando una capa ya sea de forma química o física y sobre la cual se pueden seguir acumulando capas de adsorbato según la intensidad de las fuerzas de Van der Waals, pero no mediante reacciones químicas porque la superficie interfacial ya reaccionó con la primera capa (Ira N. Levine, 2014).

Entendiendo este esquema, en el estudio de adsorción, se hace uso de un sólido con una superficie inicialmente limpia, esta superficie normalmente nunca se encuentra de esta manera y se debe recurrir a diferentes metodologías; como calentar el sólido intensamente al vacío o aún mejor, vaporizar el sólido y condensarlo al vacío o bombardear el sólido con iones de Ar^+ (Ira N. Levine, 2014). Experimentalmente, lo que se mide es la cantidad de gas adsorbido a temperatura específica en función de la presión del gas equilibrado con el sólido. La cantidad de gas adsorbido en n moles se puede calcular mediante una ecuación de estado al observar la diferencia en la presión del gas cuando se pone en contacto con el adsorbente. Al repetir este experimento midiendo una serie de valores de n para diferentes presiones de equilibrio a la misma temperatura, considerando un adsorbente de masa m se obtiene la relación n/m frente a las presiones medidas se obtiene una isoterma de adsorción (Ira N. Levine, 2014).

Cuando se estudia el fenómeno de adsorción de gases es de utilidad ajustar los datos experimentales a un modelo matemático. En particular, existen dos modelos básicos ampliamente utilizados: la isoterma de Langmuir y la isoterma de Freundlich.

4.5.1 Isoterma de Langmuir

Considera que la adsorción se lleva a cabo únicamente en la superficie del adsorbato de manera que se forme la monocapa de adsorbato, no considera las interacciones y en partículas de la misma especie adsorbidas (por lo tanto, no hay adsorción encima de la monocapa), las moléculas adsorbidas ocupan una sola posición y que la superficie del sólido es uniforme.

Considerando el desarrollo de la isoterma de Gibbs, las condiciones de equilibrio entre fases y una fase gaseosa ideal. Se puede llegar a la siguiente ecuación (Smith et al., 1997):

$$\ln\left(\frac{n}{kP}\right) = \int_0^n \frac{(1-z)dn}{n} + 1 - z \quad (4.5.1)$$

Donde n es el número de moles adsorbidos por unidad de masa de adsorbato a la presión P , k es una constante exclusiva de la intersección gas-adsorbato a una temperatura constante que resulta del cociente entre n y P en el límite de baja presión; y z es el factor de compresibilidad del gas. El factor de compresibilidad puede escribirse como $z = 1$ para llegar a la ley de adsorción de Henry o puede representarse en función de n mediante alguna ecuación de estado, o bien puede usarse la ecuación de estado de la redícula de gas ideal (Smith et al., 1997):

$$z = -\frac{m}{n} \ln\left(1 - \frac{n}{m}\right) \quad (4.5.2)$$

Donde m es una constante. Al combinar estas dos expresiones se llega a lo siguiente:

$$\ln\left(\frac{n}{kP}\right) = \int_0^n \left(\frac{1}{n} + \frac{m}{n^2} \ln\left(1 - \frac{n}{m}\right)\right) dn + 1 + \frac{m}{n} \ln\left(1 - \frac{n}{m}\right) \quad (4.5.3)$$

La integral se puede resolver como se detalla a continuación:

$$\int_0^n \left(\frac{1}{n} + \frac{m}{n^2} \ln\left(1 - \frac{n}{m}\right)\right) dn = \int_0^n \frac{1}{n} dn + \int_0^n \frac{m}{n^2} \ln\left(1 - \frac{n}{m}\right) dn$$

Donde usando integración por partes para la integral de la derecha se llega a lo siguiente:

$$\ln(n) - \frac{m}{n} \ln\left(1 - \frac{n}{m}\right) \Big|_0^n - m \int_0^n \frac{1}{n(m-n)} dn$$

Finalmente usando la técnica de fracciones parciales, esta integral resulta como:

$$\begin{aligned}\int_0^n \left(\frac{1}{n} + \frac{m}{n^2} \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right) \right) dn &= \ln(n) - \frac{m}{n} \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right) - \ln(n) + \ln(m-n) \Big|_0^n \\ &= -\frac{m}{n} \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right) + \ln(m-n) \Big|_0^n\end{aligned}$$

La integral no se puede evaluar directamente por lo que conviene evaluar el límite cuando $n \rightarrow 0$.

$$-\frac{m}{n} \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right) + \ln(m-n) \Big|_0^n = -\frac{m}{n} \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right) + \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right) - \lim_{n \rightarrow 0} -\frac{m}{n} \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right)$$

Aplicando el cambio de variable $t = -\frac{m}{n}$ y considerando que $e = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{t} \right)^t$ finalmente se obtiene el valor de la integral:

$$\int_0^n \left(\frac{1}{n} + \frac{m}{n^2} \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right) \right) dn = -\frac{m}{n} \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right) + \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right) - 1$$

Al implementar esta solución con la ecuación 4.5.3 se llega a:

$$\ln \left(\frac{n}{kP} \right) = \ln \left(1 - \frac{n}{m} \right) \Rightarrow \frac{n}{kP} = 1 - \frac{n}{m}$$

Es entonces que al resolver para n y usando un cambio de variable $b = \frac{m}{k}$ finalmente se consigue la isoterma de Langmuir.

$$n = \frac{mP}{\frac{m}{k} + P} = \frac{kbP}{b + P} \quad (4.5.4)$$

Al analizar esta ecuación sobre un rango alto de presiones o desde la perspectiva del límite cuando $P \rightarrow \infty$ se obtiene información interesante

$$\lim_{P \rightarrow \infty} n(P) = \lim_{P \rightarrow \infty} \frac{mP}{\frac{m}{k} + P} = \lim_{P \rightarrow \infty} \frac{\frac{mP}{P}}{\frac{m}{kP} + \frac{P}{P}} = m$$

Esto significa que a medida que la presión aumenta, la cantidad de moles adsorbida tiene a parecerse a m , la cual se interpreta como el número de moles para el cual la monocapa está completamente cubierta. Para un sistema que se comporte de acuerdo con la isoterma de

Langmuir, esta predice la adsorción máxima sobre el adsorbato, además los datos experimentales pueden ajustarse a esta curva mediante una linealización.

$$\frac{1}{n} = \frac{b + P}{kbP} = \frac{1}{k} \left(\frac{1}{P} \right) + \frac{1}{kb} \quad (4.5.5)$$

En donde $\frac{1}{n}$ es una función lineal de $\frac{1}{P}$ con pendiente $\frac{1}{k}$ y ordenada al origen $\frac{1}{kb}$. Sin embargo, experimentalmente se ha hallado que la isoterma de Langmuir funciona especialmente mejor mientras más baja sea la cantidad de moles adsorbidos (para bajos valores de presión) y no predice a valores razonables para m (Smith et al., 1997).

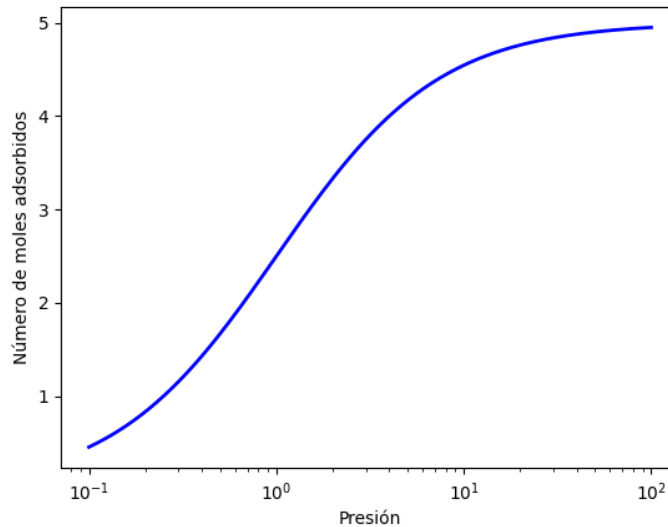


Ilustración 4.3. Ejemplo de isoterma de Langmuir

4.5.2 Isotherma de Freundlich

Esta ecuación fue propuesta en el siglo XIX mediante planteamientos empíricos, pero se puede deducir a partir de la isoterma de Langmuir considerando diferentes posiciones de adsorción (Ira N. Levine, 2014). Esta ecuación se escribe de la siguiente manera (Smith et al., 1997):

$$\frac{n}{m} = \alpha P^{\frac{1}{\beta}} \quad (4.5.6)$$

Dónde α y β son constantes ($1 < \beta$). Al igual que la isoterma de Langmuir, cuando se requiere ajustar datos experimentales a este modelo, resulta más sencillo aproximarse con una ecuación lineal que se obtiene usando la usada transformación con logaritmos.

$$\ln(n) = \ln(m\alpha P^\beta) = \ln(m\alpha) + \frac{1}{\beta} \ln(P) \quad (4.5.7)$$

Donde el logaritmo natural de n es una función lineal del logaritmo de P con pendiente $\frac{1}{\beta}$ y ordenada al origen $\ln(m\alpha)$.

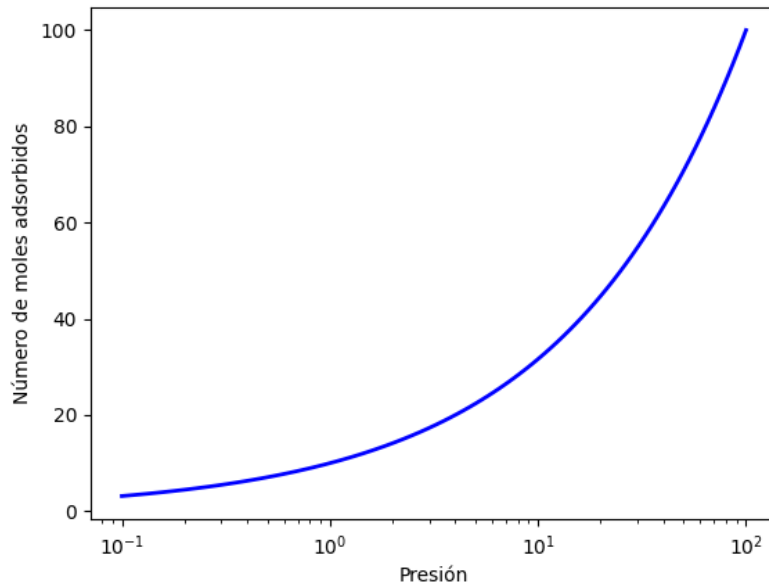


Ilustración 4.4. Ejemplo de isoterma de Freundlich.

En comparativa, la isoterma de Freundlich no puede predecir adsorción máxima como si predice la isoterma de Langmuir. Sin embargo, la falta de esta predicción suele ser compensada con una mayor exactitud cuando de presiones bajas e intermedias se trata (Smith et al., 1997).

4.5.3 Cantidad absoluta y cantidad de exceso de moles adsorbidos

Cuando se trabaja con materiales porosos, es necesario definir la superficie y el volumen en los poros. La superficie de Van der Waals se refiere al área superficial que recorrería una partícula puntal en las cavidades del material de estudio y el volumen geométrico es intuitivamente el espacio que encierra la superficie de Van der Waals. Sin embargo, cuando se estudian los poros con partículas reales (partículas de prueba), estas últimas abarcan espacio físico, lo que generalmente impide que recorran toda la superficie de Van der Waals, generando entonces un área conocida como área superficial accesible. Por ende, tampoco

pueden ocupar todo el espacio geométrico, a este espacio neto que puede ocupar la partícula de prueba se le llama volumen ocupable (Sarkisov et al., 2020).

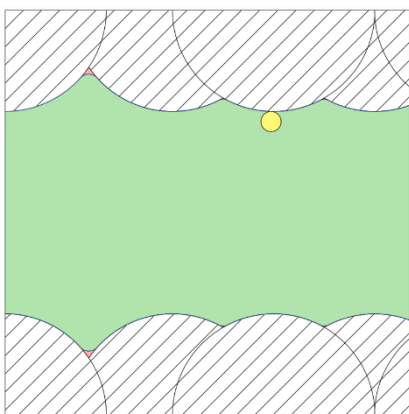


Ilustración 4.5. Volumen ocupable (área verde) y área superficial accesible (líneas azules)

Además, existen poros que no pueden ser ocupados por la partícula de prueba, ya sea porque la cavidad para llegar a él es demasiado estrecha o porque simplemente está aislado de los demás poros; a esta clase de espacio en el material poroso se le conoce como volumen no accesible. Así pues, se define una nueva clase de espacio dentro del material conocida como volumen muerto (V_{muerto}), este volumen es la resta del volumen total del sistema (muestra, poros y alrededores) y el volumen no accesible (Sarkisov et al., 2020).

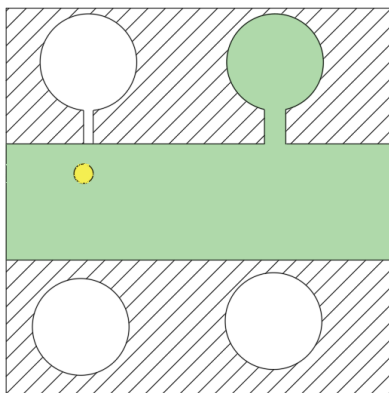


Ilustración 4.6. Ejemplo de volumen no accesible.

Es entonces que se define la cantidad de moles de exceso (n_{ex}) como la resta de los moles absolutos adsorbidos en la simulación menos la cantidad de moles que ocuparían el volumen

muerto del material sin considerar la adsorción a la temperatura y presión del experimento (Wu et al., 2014), esto se escribe como:

$$n_{ex} = n_{abs} - \rho_{bulto} V_{muerto} \quad (4.5.8)$$

4.6 *SIMULADOR LARGE-SCALE ATOMIC/MOLECULAR MASSIVELY PARALLEL SIMULATOR (LAMMPS) Y ALGUNAS CARACTERÍSTICAS*

LAMMPS es un software de código abierto distribuido bajo la licencia GPLv2, es un programa que permite hacer simulaciones de Dinámica Molecular y Monte Carlo. Es flexible en términos de procesamiento, ya que puede ejecutarse en un solo núcleo de procesamiento o incluso aprovechar la potencia del cálculo en paralelo de procesadores multinúcleo modernos para simulaciones de mayor escala y así mejorando los tiempos de simulación. Además, posee código modular para permitir a los usuarios personalizar la instalación de este software de acuerdo con las necesidades de cada simulación.

4.6.1 Potenciales

LAMMPS es un programa de gran robustez en cuanto a funcionalidades se refiere, ya que soporta potenciales por pares ampliamente utilizados, como Lennard-Jones y Buckingham, que se emplean para modelar interacciones entre átomos o partículas a corta distancia. Para interacciones que involucren partículas cargadas, LAMMPS ofrece potenciales como el Coulómbico, que modela las fuerzas electrostáticas entre cargas puntuales, y el punto-dipolo, que considera interacciones entre dipolos eléctricos.

Además, considera varios potenciales para las moléculas de acuerdo con el tipo de molécula y sus potenciales de enlace (armónico, fene, morse quartic, entre otros), los potenciales de ángulos entre tres átomos (armónico, charmm o Class II) e igualmente para el potencial de diedro (charmm, hélix o Class II) y el potencial de ángulo impropio (armónico, cvff o Class II).

4.6.2 Radio de Corte

El radio de corte (o *cutoff radius*) define hasta qué distancia se consideran las interacciones entre partículas. En LAMMPS, este radio se aplica a potenciales como Lennard-Jones, Coulomb y otros, limitando los cálculos a los vecinos dentro de esa distancia.

El uso del radio de corte mejora la eficiencia computacional, ya que evita calcular interacciones insignificantes entre partículas separadas por grandes distancias. Sin embargo, es delicado elegir un valor para el radio de corte ya que valores muy grandes aumentarían el coste computacional de forma innecesaria o un valor demasiado bajo implica ignorar aportes energéticos importantes debido a las interacciones entre pares. Además, cuando se trata de un sistema de condiciones de frontera periódica (del que se hablará más adelante) el radio de corte debe ser inferior a la mitad de la longitud del sistema para evitar que los átomos interactúen consigo mismos.

Por último, en sistemas con potenciales de largo alcance, como el Coulomb, se suelen combinar radios de corte con métodos como Ewald o PPPM para tratar las contribuciones fuera del corte.

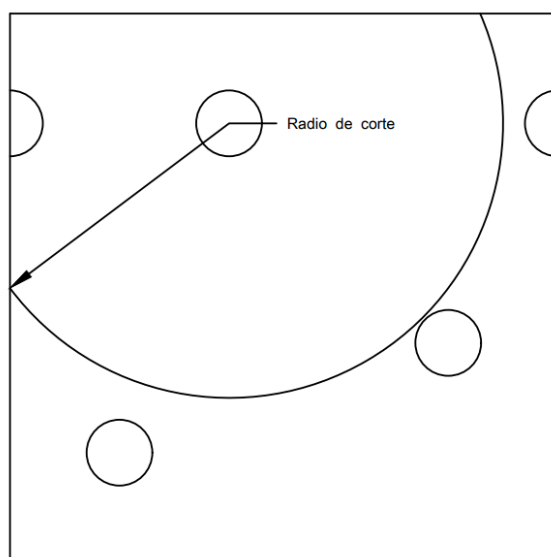


Ilustración 4.7. Visualización del radio de corte.

Ensamblajes

LAMMPS incluye ensambles estándar para dinámicas moleculares en diferentes condiciones. Los ensambles **NVE**, **NVT**, **NPT**, **NPH**, μ **VT** permiten simular sistemas con conservación de energía, potencial químico temperatura y/o presión, según el tipo de ensamble termodinámico requerido. Donde N es referente al número de átomos, V es el volumen del sistema, P la presión, T la temperatura, μ potencial químico y H la entalpía.

Control de temperatura y presión

El software permite aplicar termostatos a grupos específicos de átomos o regiones geométricas dentro del sistema. Esto proporciona flexibilidad para controlar la temperatura de manera localizada y es útil en simulaciones donde diferentes partes del sistema interactúan en condiciones térmicas distintas. Los termostatos disponibles en el programa son Nose/Hoover o Langevin que ajustan las velocidades individuales de cada molécula para generar la temperatura objetivo. Ofrece baróstatos basados en los métodos de Nose/Hoover o Berendsen para regular la presión del sistema. Estas herramientas permiten controlar la presión en 1, 2 o 3 dimensiones y se logra al regular las dimensiones de la caja de simulación.

Restricciones de cuerpo rígido

Admite la modelación de cuerpos rígidos, donde grupos de átomos se comportan como cuerpos rígidos ignorando las torsiones o alargamientos en los ángulos y enlaces respectivamente. Esto se logra actualizando las velocidades y orientaciones de los átomos en cada grupo de átomos para que el cuerpo se mueva como un solo cuerpo o se emplean algoritmos como el *SHAKE* o el *RATTLE* que logran el mismo efecto práctico.

Condiciones de contorno periódicas (*Periodic Boundary Conditions*)

La característica de fronteras periódicas (PBC) permiten modelar un sistema finito como si fuera parte de un sistema infinito, replicando el espacio simulado en todas las direcciones definidas como periódicas. Cuando se utilizan las PBC, los átomos o moléculas que salen de una frontera de la caja de simulación vuelven a entrar por el lado opuesto, manteniendo la continuidad del sistema. Es útil para evitar efectos de borde que podrían influir en los resultados, y permite simular el seno de sistemas homogéneos, como líquidos, sólidos cristalinos o gases, con un número finito de partículas. LAMMPS permite definir fronteras periódicas en una, dos o las tres dimensiones del espacio.

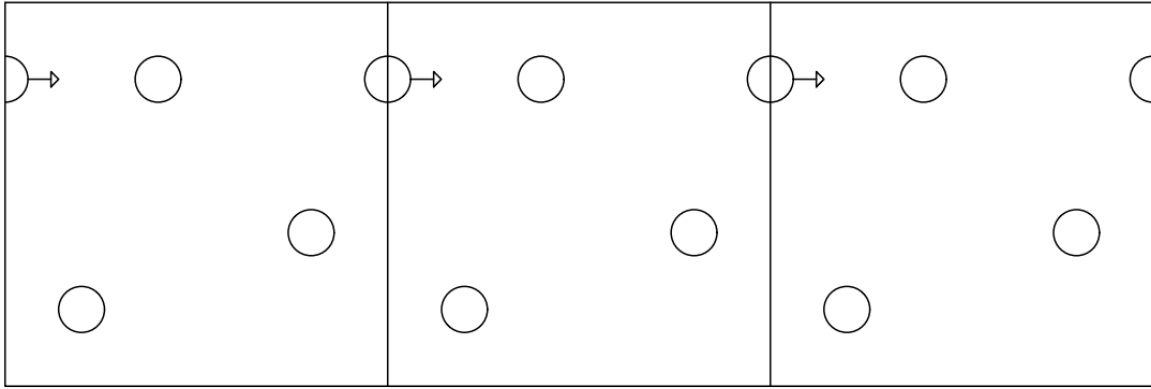


Ilustración 4.8. Visualización de PBC en una sola dirección.

4.7 MODELOS MATEMÁTICOS

Con el objetivo de intentar imitar el comportamiento real de un conjunto de moléculas es indispensable considerar las características de mayor importancia en el sistema y posteriormente darle un sentido matemático que nos permita reproducir los datos experimentales. De esta manera, una buena aproximación es considerar a los átomos como partículas puntuales con velocidades y posiciones definidas en un sistema de N partículas para después abordar estas cantidades desde la perspectiva de la mecánica estadística para constituir las propiedades macroscópicas del sistema en cuestión.

Entonces, abordando el sistema de N partículas desde la perspectiva de la mecánica clásica se le puede dar sentido a las posiciones y velocidades de cada partícula del sistema usando la segunda Ley de Newton o de una manera más fundamental, usando las ecuaciones de Euler-Lagrange. Considerando que para describir la posición de la totalidad de las partículas del sistema se requieren $3N$ coordenadas cartesianas o n coordenadas generalizadas, las ecuaciones de Euler-Lagrange se escriben como lo siguiente para la i -ésima partícula (Allen M.P. & Tildesley D.J., 1991):

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad (4.7.1)$$

Donde el lagrangiano es función de las coordenadas generalizadas, las velocidades generalizadas y el tiempo; e igual a la energía cinética menos la energía potencial:

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = T(\dot{q}) - U(q) \quad (4.7.2)$$

De estas ecuaciones se obtiene una ecuación diferencial para cada coordenada generalizada. En muchos casos, trabajar con las ecuaciones de Euler-Lagrange simplifican los cálculos al hacer uso de energías en lugar de fuerzas, además de utilizar coordenadas generalizadas que resultan más útiles en los cálculos o bien, reducen la cantidad de variables independientes en las ecuaciones.

Cuando se opta por el camino de las coordenadas cartesianas en tres dimensiones en lugar de las coordenadas generalizadas se puede llegar a la segunda ley de Newton considerando que:

$$(q_1, q_2, q_3) \rightarrow \vec{X} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \text{ y } (\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dot{q}_3) \rightarrow \dot{\vec{X}} = \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \\ \dot{z} \end{pmatrix}$$

Además, la energía cinética es únicamente función de las componentes de velocidad y no de las posiciones; así mismo, en este caso y como se especifica más adelante, la energía potencial es una función que depende exclusivamente de la posición dónde se mida; por lo que al desarrollar las derivadas en las ecuaciones de Euler-Lagrange para cada coordenada se obtiene:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \left(\frac{1}{2} m \dot{q}_i^2 - U \right) - \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\frac{1}{2} m \dot{q}_i^2 - U \right) = \frac{d}{dt} (m \dot{q}_i) + \frac{\partial U}{\partial q_i} = 0 \Rightarrow \begin{aligned} \frac{d}{dt} (m \dot{x}) &= - \frac{\partial U}{\partial x} \\ \frac{d}{dt} (m \dot{y}) &= - \frac{\partial U}{\partial y} \\ \frac{d}{dt} (m \dot{z}) &= - \frac{\partial U}{\partial z} \end{aligned}$$

Este último sistema de ecuaciones diferenciales puede ser reescrito usando la notación vectorial observando que los elementos del lado derecho son las componentes del gradiente de la función potencial, y el lado izquierdo es la derivada temporal del vector velocidad.

$$m \frac{d}{dt} \dot{\vec{X}}(t) = -\vec{\nabla} U \quad (4.7.3)$$

Retomando el cálculo vectorial, se sabe que para un campo vectorial conservativo $\vec{F}$ que depende de un vector de posiciones $\vec{X}$, siempre existe una función potencial (escalar) $U(\vec{X})$ que satisface (Lang, 1973):

$$\vec{F}(\vec{X}) = -\vec{\nabla} U(\vec{X}) \quad (4.7.4)$$

Combinando las dos últimas ecuaciones se demuestra la segunda ley de Newton para la i -ésima partícula:

$$\vec{F}_i(\vec{X}) = m_i \frac{d^2}{dt^2} X_i(t) = m_i \ddot{X}_i(t) \quad (4.7.5)$$

De esta manera se obtienen $3N$ ecuaciones de diferenciales de segundo orden o también se puede transformar en uno de primer orden al sustituir

$$\ddot{X}_i(t) = \frac{d}{dt} V_i(t) \text{ y } V_i(t) = \frac{d}{dt} X_i(t)$$

Entonces resulta un sistema de $6N$ ecuaciones diferenciales de primer orden como se muestra a continuación

$$\vec{F}_i(\vec{X}) = m_i \frac{d}{dt} V_i(t) \quad (4.7.6)$$

$$V_i(t) = \frac{d}{dt} X_i(t) \quad (4.7.7)$$

Ahora, si bien el objetivo es claro, el potencial introducido anteriormente es el principal interés, y no es para menos ya que será el eje de todo este proyecto. Este potencial lleva el nombre de campo de fuerza y es el principal determinante del comportamiento del sistema.

La forma en la que se define este potencial depende enteramente del tipo de partícula o conjunto de partículas a simular y de forma muy general se puede escribir de esta manera (Wu et al., 2014).

$$U = U_{enlazante} + U_{no\ enlazante} \quad (4.7.8)$$

Siendo

$$U_{enlazante} = U_{enlace} + U_{\text{ángulo}} + U_{\text{diedro}} + U_{\text{impropio}} \quad (4.7.9)$$

$$U_{no\ enlazante} = U_{\text{Lennard-Jones}} + U_{\text{Coulómbicas}} \quad (4.7.10)$$

Donde los potenciales de enlace, ángulo, ángulo impropio y diedro se establecen como las alteraciones en la energía potencial al estirar o acortar la distancia de equilibrio un enlace,

deformar el ángulo formado entre tres átomos respecto a un ángulo de equilibrio, el ángulo de desviación del ángulo que forma el enlace de un átomo respecto a un plano de tres átomos y la torsión estructural entre cuatro átomos unidos por enlaces. El modelo matemático usado para describir el potencial de enlace, de ángulo sencillamente un potencial de resorte armónico, y en cuanto al potencial de ángulo impropio y diedro pueden usar desde un potencial armónico, charmm u opls (estas últimas son funciones periódicas del coseno) y para el caso particular del diedro del ZIF-8 se usa el potencial charmm que se muestra a continuación.

$$U_{\text{enlace}} = K_{\text{enlace}_{ij}} (r_{ij} - b_{0_{ij}})^2 \quad (4.7.11)$$

$$U_{\text{ángulo}} = K_{\text{ángulo}_{ijk}} (\theta_{ijk} - \theta_{0_{ijk}})^2 \quad (4.7.12)$$

$$U_{\text{impropio}} = K_{\text{impropio}_{ijkl}} (\psi_{ijkl} - \psi_{0_{ijkl}})^2 \quad (4.7.13)$$

$$U_{\text{diedro}} = K_{\text{diedro}_{ijkl}} [1 + \cos (n\varphi_{ijkl} - \varphi_{0_{ijkl}})] \quad (4.7.14)$$

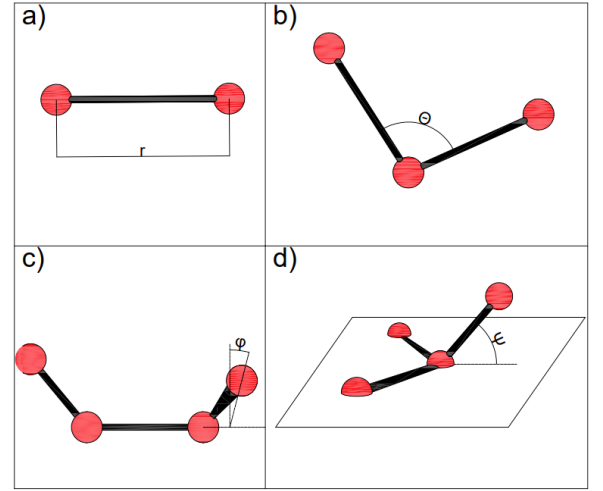


Ilustración 4.9. Interpretación física de los potenciales.
a) Enlace. b) Ángulo. c) Diedro. d) Ángulo impropio.

Dónde K_{enlace} , $K_{\text{ángulo}}$, K_{impropio} , K_{diedro} son constantes de resorte o constantes de fuerza y dependen de los parámetros i, j, k, l que indican el conjunto de átomos sobre el que se calcula el potencial y es obvio que $i \neq j \neq k \neq l$. Por otro lado, los parámetros $b_0, \theta_0, \psi_0, \varphi_0$ representan la distancia y los ángulos de equilibrio de las partículas enlazadas.

Pasando a los potenciales no enlazantes se consideran dos únicamente: las repulsiones electrostáticas de las partículas debido a sus cargas parciales modeladas de acuerdo con la ley de Coulomb y el potencial de Lennard-Jones el cual se basa en las interacciones de Van der Waals y que modela de forma consistente las altas repulsiones entre partículas a cortas distancias y a la vez la ligera atracción entre ellas a largas distancias. Las formas explícitas de estos potenciales se escriben de esta manera (Wu et al., 2014):

$$U_{LJ} = \varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (4.7.15)$$

$$U_{Coul} = \frac{q_i q_j}{\varepsilon_0 r_{ij}} \quad (4.7.16)$$

Dónde las constantes ε_{ij} representan el tamaño del pozo energético y σ_{ij} la posición de energía mínima en esta interacción. Además q_i es la carga electrostática a la partícula y r_{ij} es la distancia entre las partículas i, j y cabe resaltar que el parámetro ε_0 es la permitividad del medio y por lo tanto no debe ser confundida con la constante del pozo gravitatorio. Por último, usualmente, la norma al reportar los coeficientes del potencial de Lennard-Jones es únicamente reportar cuando $i = j$ por lo cual, para obtener los coeficientes en el caso $i \neq j$ es necesario usar una regla de mezclado como la media aritmética o geométrica.

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj}} \quad (4.7.17)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} (\sigma_{ii} + \sigma_{jj}) \quad (4.7.18)$$

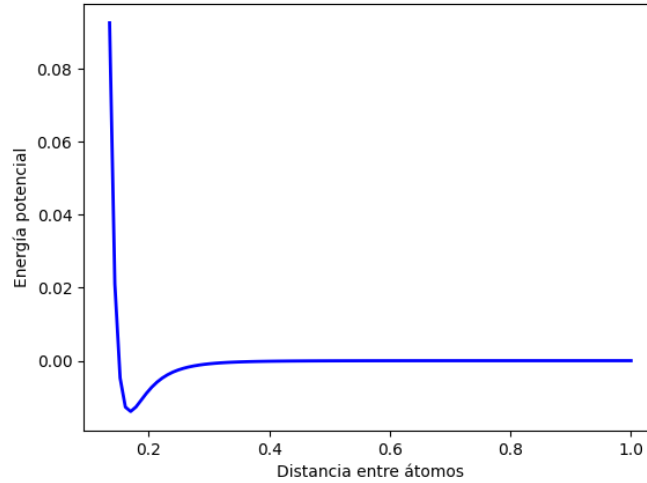


Ilustración 4.10. Potencial de Lennard-Jones.

5 DESARROLLO

Las etapas generales del proyecto se resumen en el siguiente diagrama de flujo

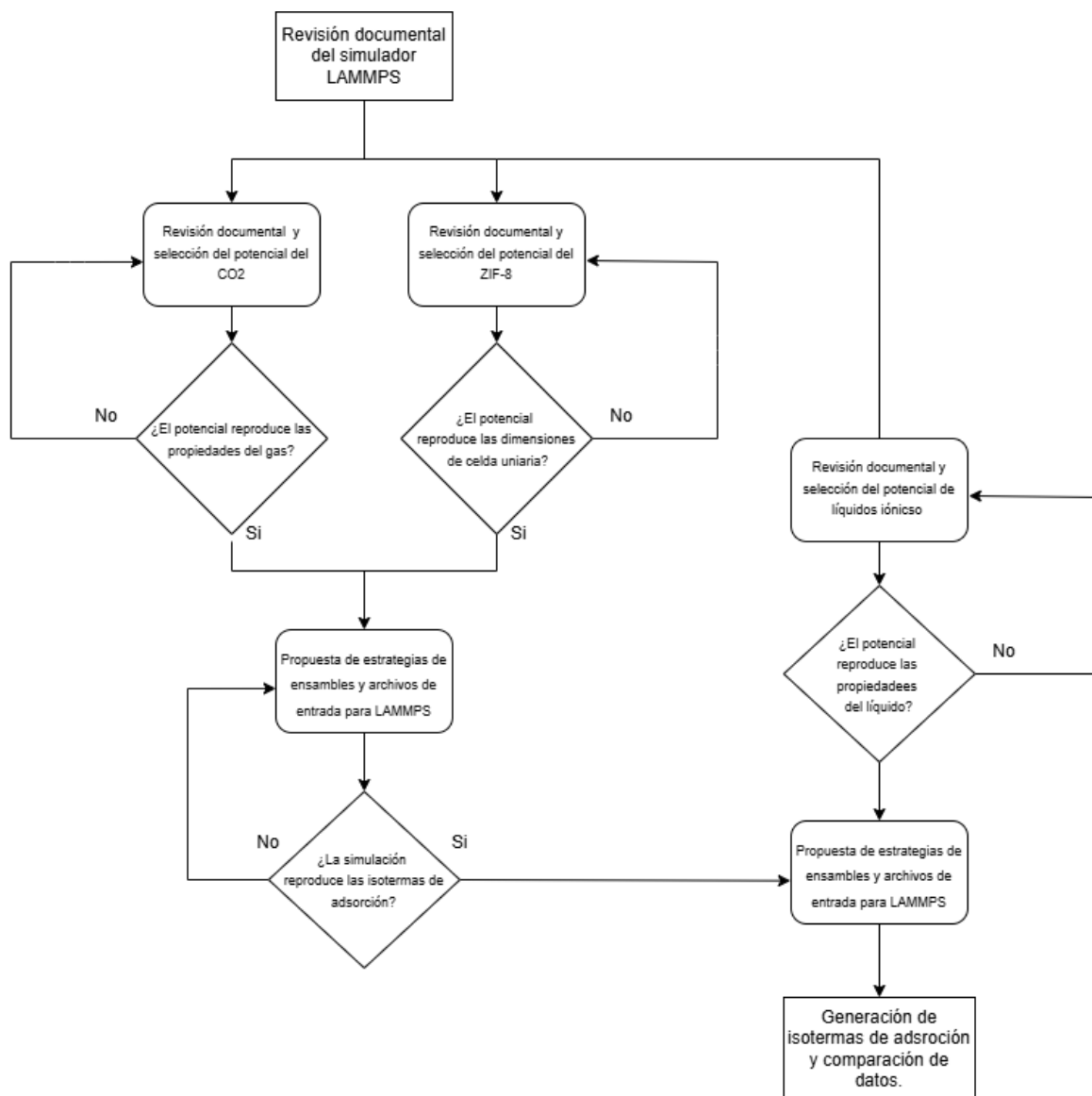


Ilustración 5.1. Etapas del proyecto.

Se realizó una revisión documental de LAMMPS (Sandia Corporation, 2025) con el objetivo de comprender los aspectos fundamentales para llevar a cabo simulaciones moleculares. Este proceso incluyó el estudio de los elementos necesarios para definir y ejecutar una simulación, tales como la selección de la geometría del sistema, la elección del método de tratamiento de las interacciones de largo alcance, los radios de corte, la definición de las condiciones límite

del sistema (periódicas o fijas), y la organización estructurada de los archivos de entrada. También se abordaron temas como la descripción de moléculas, los métodos de inicialización del sistema, y la implementación de diferentes ensambles termodinámicos (NVT, NPT y NVE). Paralelamente, se realizó un análisis teórico de los principios científicos y modelos fundamentales que sustentan estas simulaciones ya descritas en el marco teórico, lo que permitió contextualizar y justificar cada input o archivo de entrada.

Una vez alcanzado un nivel adecuado de familiarización con LAMMPS, se avanzó hacia la selección de un campo de fuerzas que representara con precisión las propiedades físicas del dióxido de carbono. Para ello, se llevó a cabo una revisión de la literatura científica relacionada con la parametrización del CO₂, poniendo atención a las distancias de enlace, las interacciones entre pares y la topología molecular de esta sustancia (posiciones y ángulos). Como resultado, se seleccionó el campo de fuerzas TraPPE (*Transferable Potentials for Phase Equilibria*). En el cual, se ignora el aporte energético de los enlaces y los ángulos manteniéndolos fijos sobre la simulación.

Tabla 5.1. Parámetros de Lennard-Jones del CO₂

i – j	$\epsilon_{ij}(\frac{Kcal}{mol})$	$\sigma_{ij}(Å)$
C-C	0.05584	2.757
C-O	0.09447	2.8917
O-O	0.15982	3.033

Tabla 5.2. Cargas parciales, distancia y enlace de ángulo del CO₂

q_c (e)	0.6512
q_o (e)	-0.3256
r_{c-o}(Å)	1.16
θ_{o-c-o}(°)	180

La validez del modelo fue evaluada mediante simulaciones a temperatura constante y variando el volumen, con el objetivo de reproducir gráficas de presión frente a densidad del CO₂ reportadas en la literatura. Todas estas pruebas se realizaron con un ensamble NPT con una temperatura de 300 K, un radio de corte de 12.5Å y 1x10⁶ fms en cada simulación. Entonces se obtuvieron los siguientes datos de presión contra densidad a una temperatura de 300K en comparativa con la bibliografía (NIST, 2021).

Tabla 5.3. Comparativa de densidades del CO₂.

Densidad (mol/L)	Presión de bibliografía	Presión simulada (atm)	Desviación estándar
0.005	0.1231	0.1224	0.0109
0.05	1.225	1.2358	0.0789
0.5	11.65	11.3345	0.687327
1.0	21.98	20.8158	2.6064

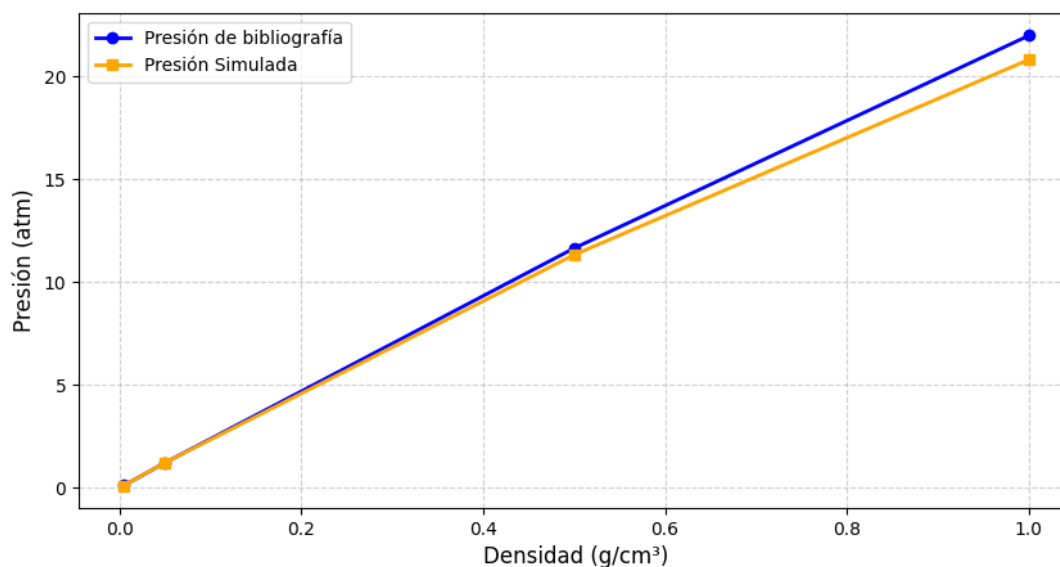


Ilustración 5.2. Densidad del CO₂ simulada vs bibliografía.

Posteriormente, se realizó una revisión bibliográfica específica sobre la adsorción de dióxido de carbono en ZIF-8. Este análisis permitió identificar un conjunto de parámetros de campo de fuerzas adecuados para describir la estructura y las propiedades del ZIF-8. A partir de esta información, se planteó una estrategia para configurar los ensambles en LAMMPS, con el fin de replicar las isothermas de adsorción de CO₂ reportadas en la literatura (Wu et al., 2014) (Zheng et al., 2012a).

Tabla 5.4. Potencial de enlace para el ZIF-8

Tipo de enlace	$K_b(\frac{Kcal}{molA^2})$	$b_0(A)$
C1-C3	346.543	1.490
C1-N	488.000	1.335
C2-N	440.210	1.370
C2-H2	367.000	1.080
C2-C2	540.249	1.350
C3-H3	340.000	1.090
Zn-N	79.500	2.011

Tabla 5.5. Potencial de ángulo para el ZIF-8

Tipo de ángulo	$K_\theta(\frac{kcal}{mol(rad)^2})$	$\theta_0(^{\circ})$
N-C1-N	75.484	112.16
N-C1-C3	66.015	123.92
C2-C2-N	73.75	108.65
C2-C2-H2	49.451	125.67
N-C2-H2	49.088	109.32
C1-C3-H3	48.088	109.32
C1-N-C2	71.254	105.27
C1-N-Zn	48.680	128.33
C2-N-Zn	32.477	126.40
N-Zn-N	35.240	107.48
H3-C3-H3	35.000	109.50

Tabla 5.6. Potencial de diedro para el ZIF-8

Tipo	$K_\varphi(\frac{Kcal}{mol})$	n	$\varphi_0(^{\circ})$
X-N-C2-X	2.325	2	180
X-C2-C2-X	5.150	2	180
X-C1-N-X	5.000	2	180

Tabla 5.6. Potencial del ángulo impropio

Tipo	$K_\psi(\frac{kcal}{mol(rad)^2})$	$\psi_0(^{\circ})$
N-C3-C1-N	2.000	180
C2-H2-C2-N	2.000	180
C2-Zn-N-C1	2.000	180

Tabla 5.7. Potencial de Lennard-Jones y cargas parciales para el ZIF-8

Átomo	ϵ ($\frac{Kcal}{mol}$)	σ (Å)	q(e)
Zn	0.0125	1.960	0.7362
N	0.1700	3.250	-0.3008
C1	0.0860	3.400	0.4339
C2	0.0860	3.400	-0.1924
C3	0.0860	3.400	-0.6024
H2	0.0150	2.511	0.1585
H3	0.0157	2.650	0.1572

La validación del campo de fuerzas del ZIF-8 se consigue reproduciendo los parámetros de rejilla. La simulación se llevó a cabo usando un ensamble NPT a 298K usando 2x2x2 celdas unitarias de ZIF-8, un radio de corte de 14 Å; factor de escala para enlaces especiales 1-4 de 0.5 para las interacciones LJ y 0.83333 para las interacciones coulómbicas y un tiempo de simulación de 1.3×10^5 fms. La simulación coincide con la longitud de la celda unitaria reportada (Zheng et al., 2012b) $\sim 16.8 \text{Å}$ por celda unitaria.

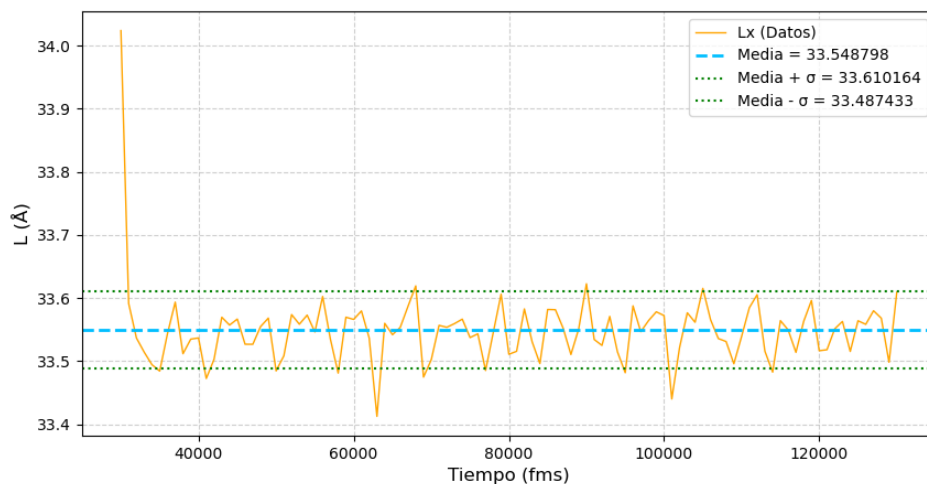


Ilustración 5.3. Tamaño de rejilla para dos celdas unitarias de ZIF-8.

Con estos datos se propuso un ensamble en LAMMPS para intentar reproducir la cantidad de moles adsorbida por el ZIF-8 a 298 K. Sin embargo, al montar ensambles NVT tanto para el gas como para la zeolita en conjunto con el ensamble GCMC, se encontró que LAMMPS tiene problemas para calcular la temperatura global del sistema (promediando por encima de los 310K). Además, la adsorción del CO₂ durante el ensamble GCMC sólo converge en un rango presión menor a las 3 atm, pues a partir de una presión mayor o igual a 3 atm, el número de moléculas de CO₂ insertadas no para de crecer.

Tras realizar una serie de pruebas variando los termostatos de la simulación (Nosé-Hoover y Langevin) y la configuración del ensamble GCMC (cantidad de intentos por paso y cada cuantos pasos se ejecuta); y notar que los mismos problemas mencionados anteriormente persistían, se implementó un campo de fuerzas flexible para el CO₂. Una vez implementadas las constantes de resorte para el enlace y el ángulo del CO₂ $k_b = 1008 \frac{kcal}{mol \cdot \text{\AA}^2}$ $k_\theta = 54 \frac{kcal}{mol \cdot rad^2}$ (Cygan et al., 2012) se comprobó que la temperatura del sistema se amortizaba correctamente sobre los 298 K. Además, aunque la adsorción del CO₂ se comporta de acuerdo con lo experimental a presiones bajas y converge a incluso después de las 3 atm, falla rotundamente en reproducir la isoterma de adsorción (Hwang et al., 2022) a partir de este mismo valor de presión en adelante. La cantidad de CO₂ adsorbida es reportada según los moles en exceso calculados con la ecuación 6.7.8 donde la densidad de bulto del CO₂ fue calculada usando la ecuación de estado Redlich–Kwong para cada presión de la isoterma.

Tabla 5.8. Comparativa de moles adsorbidos en ZIF-8 Hwang et al., 2022 vs simulado en este proyecto

Presión (atm)	N_{exceso} Experimental (mmol/gZIF-8)	N_{exceso} simulado (mmol/gZIF-8)
0.1973847	0.131	0.180406873
0.43424624	0.286	0.369203924
0.6908463	0.456	0.50449785
1.480385	0.985	0.849184518
2.9805083	2.058	1.536306929
4.8457932	3.352	2.110888254
7.0268937	4.57	2.491259035
9.6915865	5.569	2.770863591
14.991364	6.604	3.393107724
20.123365	7.047	3.555836218
29.874167	7.248	4.102635843

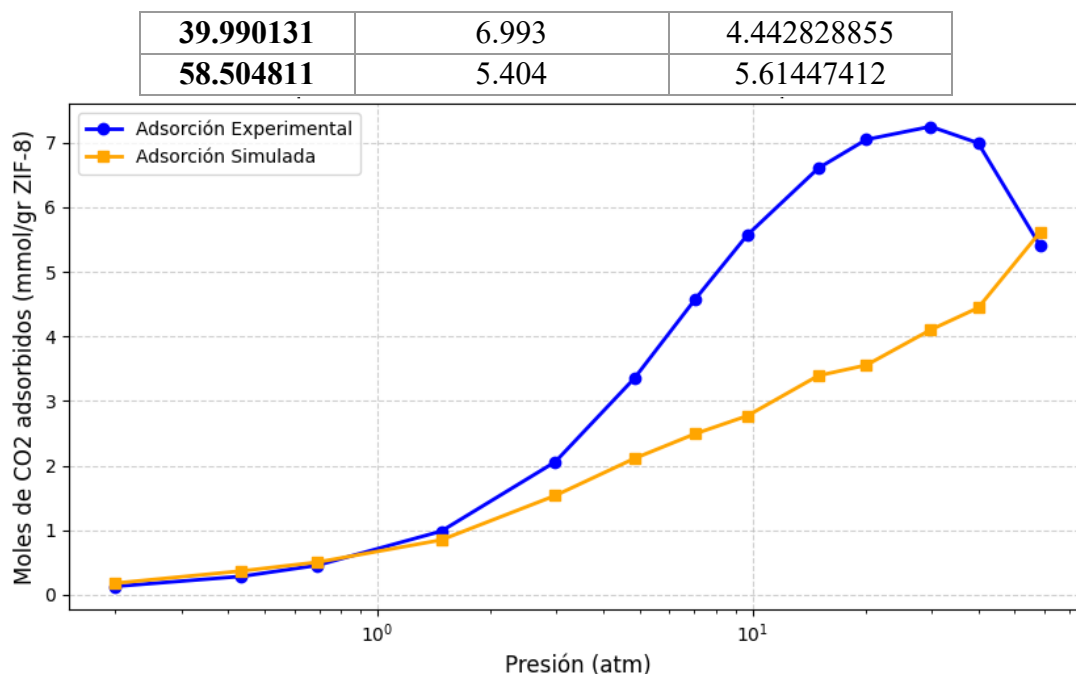


Ilustración 5.4. Adsorción simulada comparada con la adsorción reportada en Hwang et al., 2022

Dada la poca fiabilidad de las simulaciones a partir de las 3 atm, se optó por ajustar la isoterma de adsorción sobre una curva, usando las ecuaciones linealizadas de Langmuir y Freundlich con la finalidad de mejorar la predicción de adsorción sobre un mayor rango de presiones.

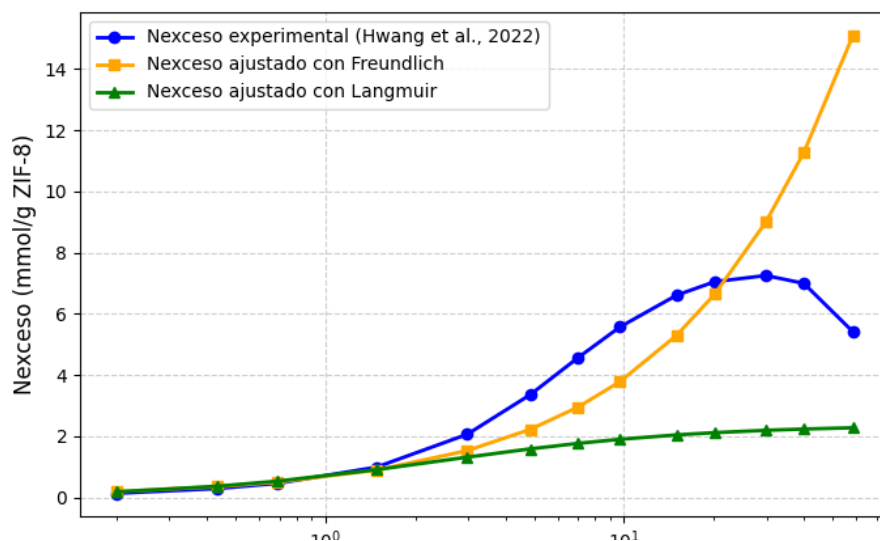


Ilustración 5.5. Comparativa de adsorción experimental vs ajustes con Langmuir y Freundlich.

En cuanto a los líquidos iónicos usados en este proyecto (Emim-BF₄ y Bmim-NTf₂) el campo de fuerzas se justificó sobre la simulación y por ende reproducción de la densidad experimental de cada una de estas sustancias que se muestran en la tabla 10. Los potenciales del Emim-BF₄ (Doherty et al., 2017) y del Bmim-NTf₂ (Perez-Blanco & Maginn, 2010) pueden consultarse en el anexo.

Las condiciones de simulación fueron un radio de corte de 10 Å para las interacciones LJ y 12 Å para las coulómbicas, para las moléculas enlazadas 1-4 un factor de 0.5 para ambos potenciales no enlazantes (LJ y coulóbico) tanto para el Bmim-NTf₂ como para el Emim-BF₄ Los tiempos de simulación fueron 5×10^5 fms.

Tabla 5.9. Comparativa de densidades simuladas vs experimentales Bmim-NTf₂ a 298.15K (Hamidova et al., 2015).

Presión (atm)	Densidad de bibliografía (g/cm ³)	Densidad simulada (g/cm ³)	Desviación estándar
0.996	1.43676	1.45940	0.01296
12.188	1.43763	1.46409	0.01150
98.751	1.44418	1.45275	0.01193

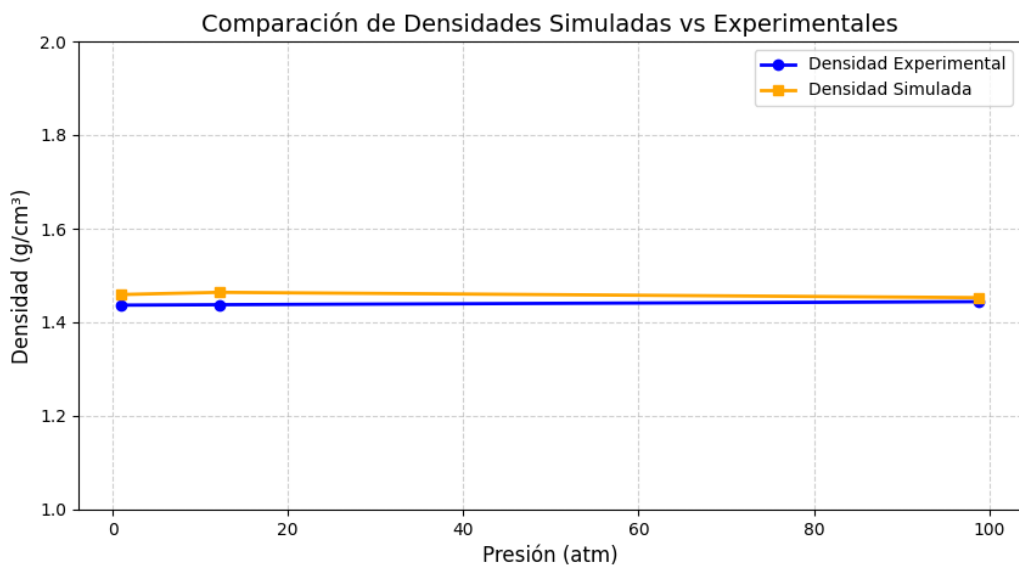


Ilustración 5.6. Comparativa de densidades simuladas vs experimentales Bmim-NTf₂ (Hamidova et al., 2015).

En el caso del Emim-BF₄, se reporta un único valor de densidad para 298.15 K(Doherty et al., 2017)y por tanto se realizaron tres simulaciones variando la semilla para corroborar el resultado.

Tabla 5.10. Comparativa de densidades simuladas vs experimentales Emim-BF₄ a 298.15K y 1 atm (Doherty et al., 2017).

Densidad de bibliografía (g/cm ³)	Densidad simulada (g/cm ³)	Media (g/cm ³)	Desviación estándar
1.273	1.246	1.238	0.0069
	1.239		
	1.229		

Una vez validado el campo de fuerzas del CO₂, del ZIF-8, de los líquidos iónicos y la reproducción parcial de la isoterma de adsorción del CO₂ sobre el ZIF-8 se procedió impregnación de los líquidos iónicos en la estructura del ZIF-8. Se plantearon cuatro casos: dos usando Emim-BF₄ y dos con Bmim-NTf₂; en los casos de Emim-BF₄ uno fue insertando tres de estas moléculas y en el otro caso se insertaron siete de estas mismas moléculas. Los casos del Bmim-NTf₂ son completamente análogos a los ya explicados y cabe resaltar que en todos los casos se usaron las mismas ocho celdas unitarias de ZIF-8 de base.

Una vez impregnadas las celdas unitarias de ZIF-8 se incorporó nuevamente una serie de ensambles NVT para cada fase con su propio termostato aunado a un ensamble GCMC que insertara las moléculas de CO₂ al sistema desde un reservorio hipotético.

6 RESULTADOS

Los cuatro casos simulados con las dos moléculas de líquido iónico se muestran a continuación, considerando la validez de los resultados únicamente hasta las 3 atm de presión.

Tabla 6.1. Adsorción simulada de CO_2 en ZIF-8 impregnado con Emim- BF_4 .

Presión (atm)	Nexceso simulado (mmol/gZIF-8)	Nexceso con Emim- BF_4 (mmol/gZIF-8)	
		3 moléculas (0.1373 mmol/gr ZIF-8)	7 moléculas (0.3204 mmol/gr ZIF-8)
0.19738	0.180406873	0.323868097	0.420192992
0.4342	0.369203924	0.619116851	0.646058637
0.6908	0.50449785	0.947704356	0.888657629
1.4803	0.849184518	1.547284125	1.563533418
2.9805	1.536306929	2.217503789	2.126416201

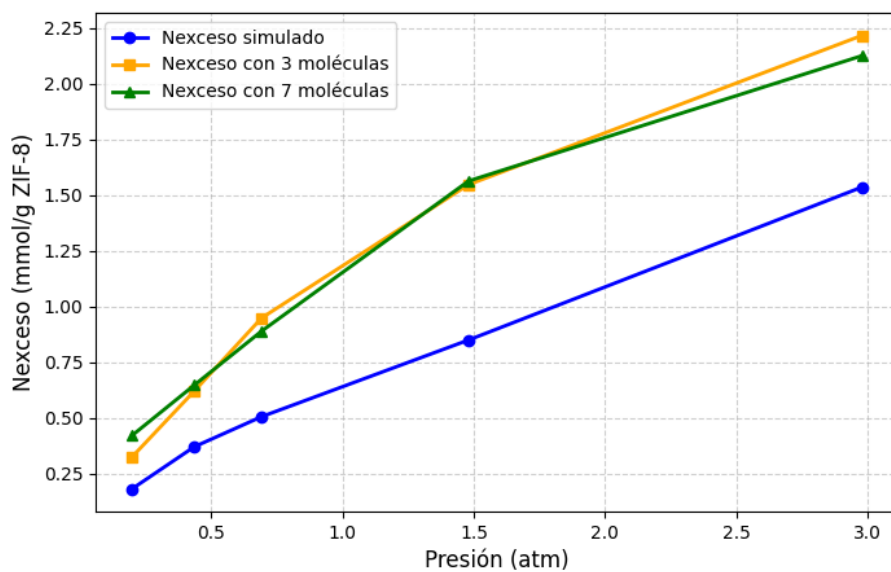


Ilustración 6.1. Comparativa de adsorción simulada usando Emim- BF_4 .

Tabla 6.2. Adsorción simulada de CO₂ en ZIF-8 impregnado con Bmim-NTf₂.

Presión (atm)	N _{exceso} simulado (mmol/gZIF-8)	N _{exceso} con Bmim-NTf ₂ (mmol/gZIF-8)	
		3 moléculas (0.1373 mmol/gr ZIF-8)	7 moléculas (0.3204 mmol/gr ZIF-8)
0.1973847	0.1804	0.2552	0.3007
0.43424624	0.3692	0.5857	0.4923
0.6908463	0.5044	0.7829	0.6559
1.480385	0.8491	1.3014	1.1197
2.9805083	1.5363	2.0824	1.7295

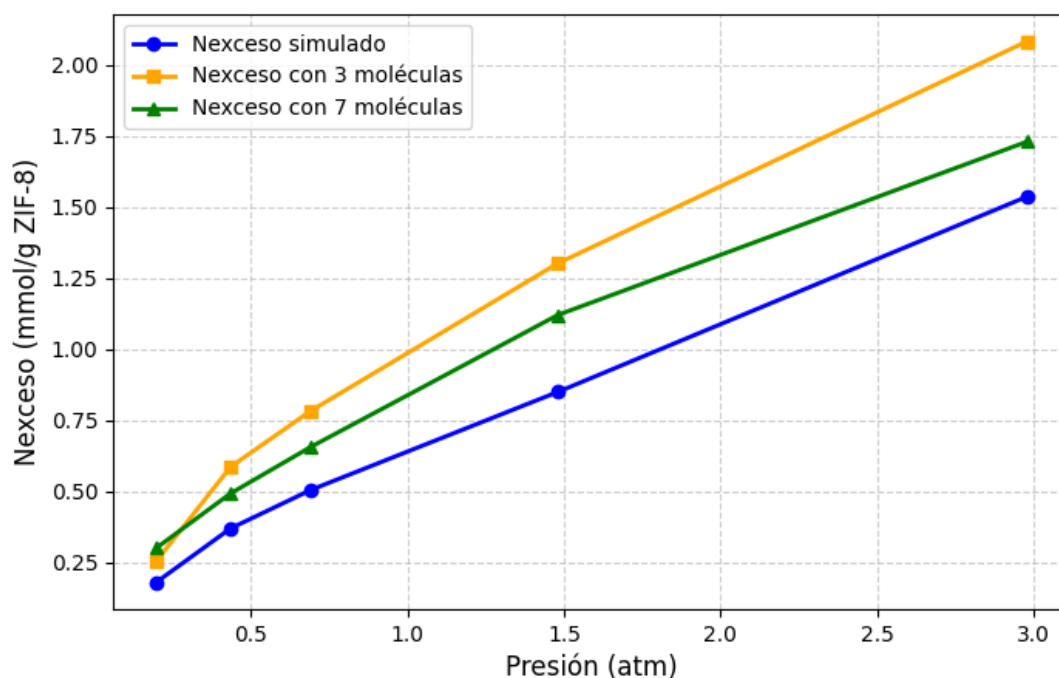


Ilustración 6.2. Comparativa de adsorción simulada usando Bmim-NTf₂.

Al ajustarse según la isoterma de Freundlich, la predicción se extiende hasta un rango de 20 atm aproximadamente y permite realizar un mejor análisis sobre la mejora de adsorción sobre un rango de presión más alto.

Tabla 6.3. Adsorción de CO₂ en ZIF-8 impregnado con Emim-BF₄ ajustada con la isoterma de Freundlich

Presión (atm)	N _{exceso} sin IL (mmol/gZIF-8)	N _{exceso} con Emim-BF ₄ (mmol/gZIF-8)	
		3 moléculas (0.1373 mmol/gr ZIF-8)	7 moléculas (0.3204 mmol/gr ZIF-8)
0.1973	0.1885	0.3494	0.4135
0.4342	0.3460	0.6131	0.6737

0.6908	0.4948	0.8539	0.8980
1.4803	0.8899	1.4706	1.4392
2.9805	1.5254	2.4226	2.2193
4.8457	2.2179	3.4265	2.9982
7.0268	2.9529	4.4666	3.7735
9.6915	3.7825	5.6180	4.6044
14.991	5.2926	7.6685	6.0314
20.123	6.6395	9.4605	7.2369

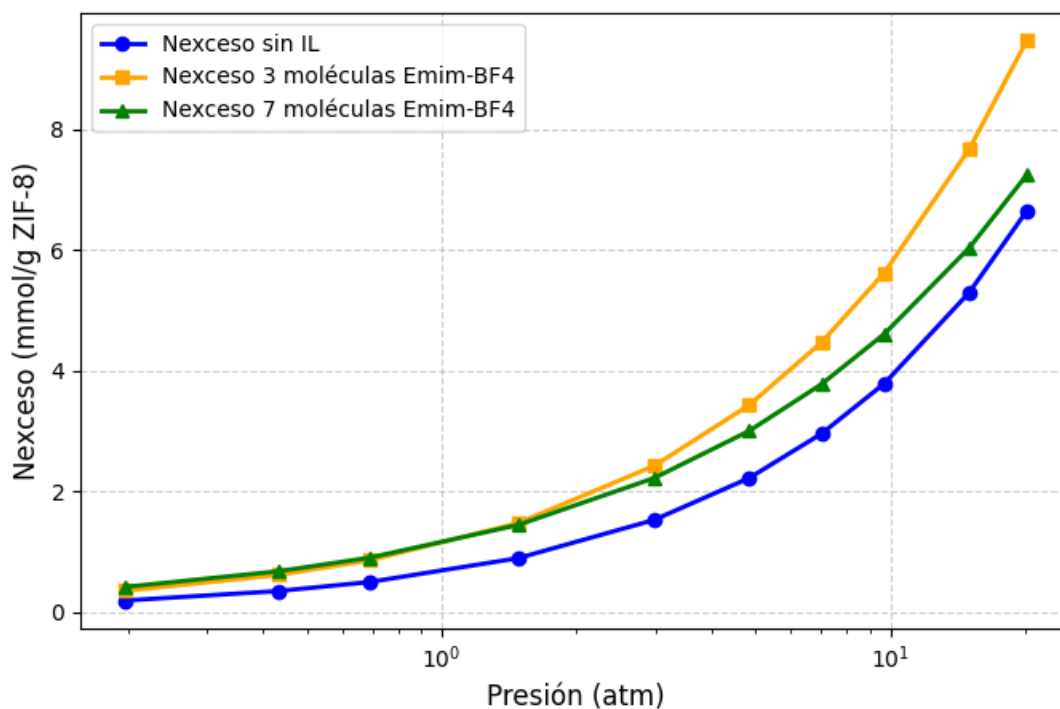


Ilustración 6.3. Comparativa de adsorción usando Emim-BF_4 con datos ajustados.

Tabla 6.4. Adsorción de CO_2 en ZIF-8 impregnado con Bmim-NTf_2 ajustada con la isoterma de Freundlich.

Presión (atm)	Nexceso sin IL (mmol/gZIF-8)	Nexceso con Bmim-NTf ₂ (mmol/gZIF-8)	
		3 moléculas (0.1373 mmol/gr ZIF-8)	7 moléculas (0.3204 mmol/gr ZIF-8)
0. 1973	0.1885	0.2870	0.2971
0.4342	0.3460	0.5193	0.4958
0.6908	0.4948	0.7364	0.6703
1.4803	0.8899	1.3064	1.0995
2.9805	1.5254	2.2115	1.7320
4.8457	2.2179	3.1876	2.3748
7.0268	2.9529	4.2157	3.0230

9.6915	3.7825	5.3691	3.7249
14.991	5.2926	7.4542	4.9447
20.123	6.6395	9.3020	5.9865

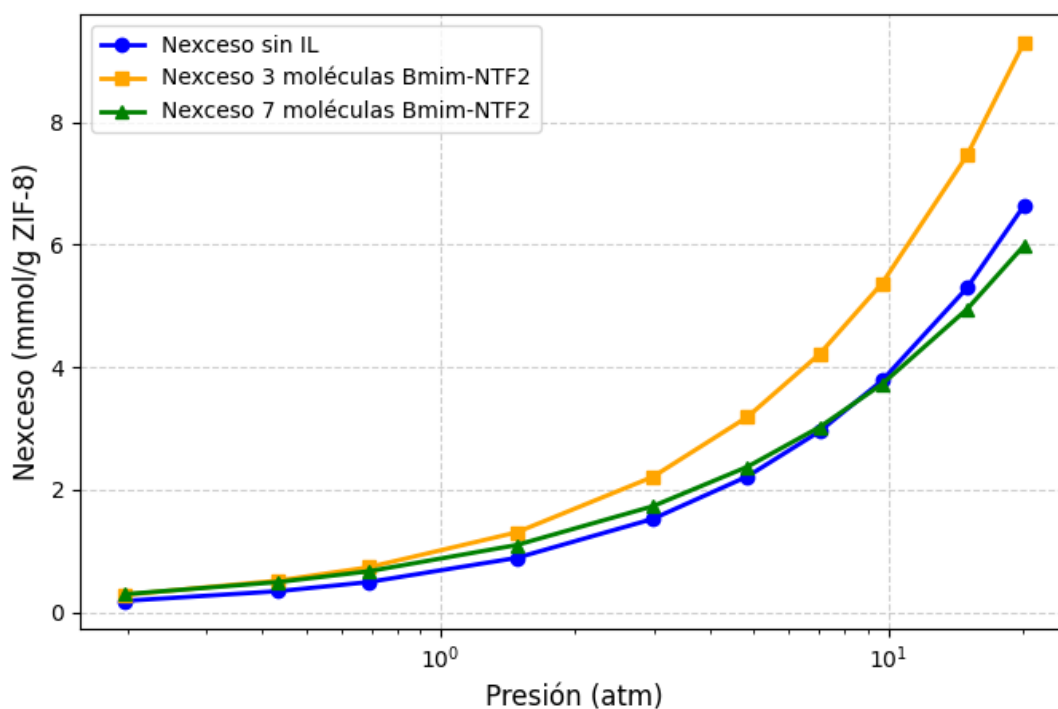


Ilustración 6.4. Comparativa de adsorción usando Bmim-NTf₂ con datos ajustados.

Comparando la mejora de adsorción para cada punto de la curva y promediando estas cantidades de mejora se obtiene la siguiente tabla.

Tabla 6.5. Mejora porcentual promedio en cada caso de simulación.

Caso de simulación	Mejora porcentual respecto al caso sin líquido iónico
3 moléculas de Emim-BF ₄	+60.07%
7 moléculas de Emim-BF ₄	+51.03%
3 moléculas de Bmim-NTf ₂	+45.22%
7 moléculas de Bmim-NTf ₂	+16.49%

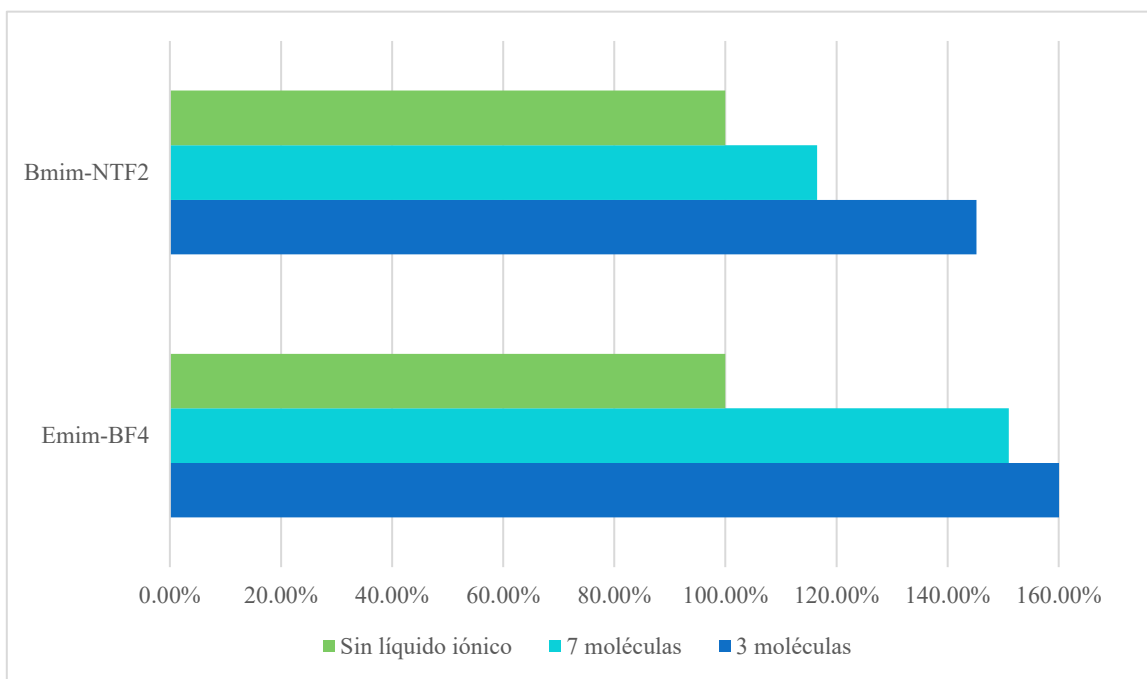


Ilustración 6.5. Mejora porcentual con uso de líquidos iónicos vs sin líquido iónico.

7 CONCLUSIONES

Es notoria la diferencia entre la adsorción simulada y los datos experimentales reportados, únicamente consistente en un rango de bajas presiones. Sin embargo, después de realizar una diversidad de pruebas en los ensambles que van desde variar los tiempos para amortizar la temperatura, probar diferentes termostatos e incluso variar los parámetros del ensamble GCMC; mientras se mantenía la molécula de CO_2 rígida, no se consiguió estabilizar la temperatura en los 298K ni la convergencia de la adsorción por encima de las tres atmósferas de presión.

El problema para estabilizar la temperatura fue principalmente debido a la combinación del GCMC con una molécula rígida y lineal como el CO_2 en LAMMPS, ya que al incluir las constantes de enlace y resorte este problema se fue. Lo que si persistió fue la disparidad de datos a partir de las tres atmósferas de presión. Esta disparidad podría deberse al simulador, puesto que el fuerte de LAMMPS se centra en la dinámica molecular y parece ser que su método de Monte Carlo aún no está del todo desarrollado. Esto último aunado al hecho de que en los artículos revisados LAMMPS es usado únicamente en la DM para calcular propiedades de bulk; pero respecto a la adsorción usando MC se usaron otros softwares.

Sin embargo, al hacer uso de las isothermas de Freundlich y Langmuir se observó lo que ya se discutía anteriormente; la isoterma de Langmuir predice exitosamente la adsorción a medida que la presión disminuye y la predicción de los moles de saturación de la monocapa falla rotundamente. Por otro lado, aunque el ajuste con la isoterma de Freundlich no dispone de una predicción de adsorción máxima, si que se ajusta bien en un rango bajo de presiones además de mejorar la predicción de la adsorción en presiones intermedias respecto a lo simulado y a la isoterma de Langmuir. Esto permite hacer un análisis más amplio del cambio en la adsorción usando los líquidos iónicos.

Por otro lado, se observa que la adsorción usando líquidos iónicos mejora en ambos casos. Principalmente el caso del Emim- BF_4 el cual tuvo la mayor cantidad de adsorción usando únicamente tres moléculas en ocho celdas unitarias de la zeolita. Esto puede explicarse partiendo del hecho de que es el líquido iónico más pequeño de los dos casos y por lo tanto permite la inserción de más moléculas del gas en la estructura del ZIF-8. Además, el insertar más moléculas del líquido, esto resultaría contraproducente al ocupar el espacio que necesita el CO_2 para incorporarse en el sistema, reduciendo las posibilidades de adsorción.

Es esta misma razón la que explica por qué el Bmim- NTf_2 presentó menos adsorción usando tres moléculas y aún menos adsorción usando siete moléculas, puesto que este líquido, tanto su ion como su catión son físicamente más grandes que sus análogos en el Emim- BF_4 . Aunque en general mejora la adsorción del gas, es cierto que insertar demasiadas moléculas o en su defecto demasiado grandes, no resulta en lo óptimo para la adsorción del gas al ocupar más espacio dentro de la zeolita. Incluso llega a resultar contraproducente en el caso de siete moléculas del BMIM- NTf_2 al empeorar la adsorción respecto a la ausencia de IL en un rango de presiones más elevadas.

8 FUENTES DE INFORMACIÓN

- Allen M.P., & Tildesley D.J. (1991). *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press.
- Battisti, A., Taioli, S., & Garberoglio, G. (2011). Zeolitic imidazolate frameworks for separation of binary mixtures of CO₂, CH₄, N₂ and H₂: A computer simulation investigation. *Microporous and Mesoporous Materials*, 143(1), 46–53. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2011.01.029>
- Cygan, R. T., Romanov, V. N., & Myshakin, E. M. (2012). Molecular simulation of carbon dioxide capture by montmorillonite using an accurate and flexible force field. *Journal of Physical Chemistry C*, 116(24), 13079–13091. <https://doi.org/10.1021/jp3007574>
- Doherty, B., Zhong, X., Gathiaka, S., Li, B., & Acevedo, O. (2017). Revisiting OPLS Force Field Parameters for Ionic Liquid Simulations. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 13(12), 6131–6135. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00520>
- Energy Institute. (2010). *Good plant design and operation for onshore carbon capture installations and onshore pipelines : a recommended practice guidance document*. Energy Institute.
- Enrico Bodo, ., & Valentina Migliorati, . (2011). *IONIC LIQUIDS – CLASSES AND PROPERTIES* (Scott T. Handy, Ed.). INTECH Open Access Publisher.
- Hamidova, R., Kul, I., Safarov, J., Shahverdiyev, A., & Hassel, E. (2015). Thermophysical properties of 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide at high temperatures and pressures. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 32(1), 303–316. <https://doi.org/10.1590/0104-6632.20150321s00003120>
- Hwang, J., Azzan, H., Pini, R., & Petit, C. (2022). H₂, N₂, CO₂, and CH₄Unary Adsorption Isotherm Measurements at Low and High Pressures on Zeolitic Imidazolate Framework ZIF-8. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 67(7), 1674–1686. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.1c00900>
- Ira N. Levine. (2014). *Principios de fisicoquímica* (5th ed., Vol. 1). McGraw Hill.
- Lang, S. (1973). *CALCULUS OF SEVERAL VARIABLES*.
- NIST. (2021, June 2). *LAMMPS MD: Equation of State (pressure vs. density) - TraPPE Carbon Dioxide*. <https://www.nist.gov/mml/csd/chemical-informatics-group/lammps-md-equation-state-pressure-vs-density-trappe-carbon>
- Perez-Blanco, M. E., & Maginn, E. J. (2010). Molecular dynamics simulations of CO₂ at an ionic liquid interface: Adsorption, ordering, and interfacial crossing. *Journal of Physical Chemistry B*, 114(36), 11827–11837. <https://doi.org/10.1021/jp103862v>

- Ramírez Ortega, D., T.E., B. R., Chavez Miyauchi, Urbina González, H., & Jiménez Camus, M. (2018). *Síntesis y estudio de la red metal-orgánica MOF ZIF-8 para el transporte de fármacos. Memorias del XX Concurso Lasallista de investigación, desarrollo e innovación CLIDi.*
- Romero Placeres, M., Francisca Diego Olite, L., & Mireya Álvarez Toste, D. (2006). Revisión bibliográfica La contaminación del aire: su repercusión como problema de salud. In *Rev Cubana Hig Epidemiol* (Vol. 44, Issue 2).
- Sandia Corporation. (2025, February 4). *LAMMPS Documentation*. <https://docs.lammps.org/Manual.html>.
- Sarkisov, L., Bueno-Perez, R., Sutharson, M., & Fairen-Jimenez, D. (2020). Materials Informatics with PoreBlazer v4.0 and the CSD MOF Database. *Chemistry of Materials*, 32(23), 9849–9867. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c03575>
- Silva Reynoso Yosirine Quetzalli. (2016). *Síntesis y caracterización de membranas de ZIF, soportadas en α -alúmina*. Universidad Autónoma del Estado de México.
- Smith, J. M., Van Ness, H. C., & Abbott, M. M. (1997). *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química* (E. G. Urbina Medal & M. del C. Hidalgo Mondragón, Trans.; 5th ed.).
- Villegas-Fernández, M. H., Carpio-Granillo, M., Vargas-Hernández, E., Zuno-Cruz, F. J., & Sánchez-Cabrera, G. (2021). Una revisión general de las estructuras metal-orgánicas (MOF) dentro de la química inorgánica. *Pädi Boletín Científico de Ciencias Básicas e Ingenierías Del ICBI*, 8(16), 18–29. <https://doi.org/10.29057/icbi.v8i16.5775>
- Wu, X., Huang, J., Cai, W., & Jaroniec, M. (2014). Force field for ZIF-8 flexible frameworks: Atomistic simulation of adsorption, diffusion of pure gases as CH₄, H₂, CO₂ and N₂. *RSC Advances*, 4(32), 16503–16511. <https://doi.org/10.1039/c4ra00664j>
- Zheng, B., Sant, M., Demontis, P., & Suffritti, G. B. (2012a). Force field for molecular dynamics computations in flexible ZIF-8 framework. *Journal of Physical Chemistry C*, 116(1), 933–938. <https://doi.org/10.1021/jp209463a>
- Zheng, B., Sant, M., Demontis, P., & Suffritti, G. B. (2012b). Force field for molecular dynamics computations in flexible ZIF-8 framework. *Journal of Physical Chemistry C*, 116(1), 933–938. <https://doi.org/10.1021/jp209463a>

9 ANEXOS

REMOCIÓN DE CO₂ USANDO ESTRUCTURAS METAL-ORGÁNICAS IMPREGNADOS DE LÍQUIDOS IÓNICOS

<https://mailita->

my.sharepoint.com/:f/g/personal/20150642_aguascalientes_tecnm_mx/EuYuf3_SUKtIpm1AH9y9HmMBn8n89vKCV7DDNtUI8a3y4Q?e=P2n043