

## Introducción:

El  $H_2S$ ,  $SO_2$ ,  $CO_2$  y  $CO$  son gases contaminantes, además de ser sustancias nocivas y peligrosas emitidas por diferentes industrias químicas. Los Metal-Organic Frameworks (MOFs), han sido considerados para la captura de estas moléculas, sin embargo, sólo algunos de ellos demostraron ser estables a su exposición. Este proyecto busca contribuir a la captura de estos gases.

## MOFs estudiados:

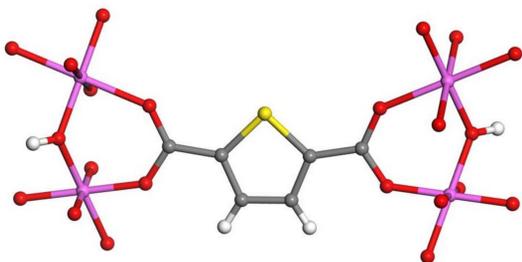


Fig. 1: MIL-53(Al)-TDC, [Al(OH)TDC]

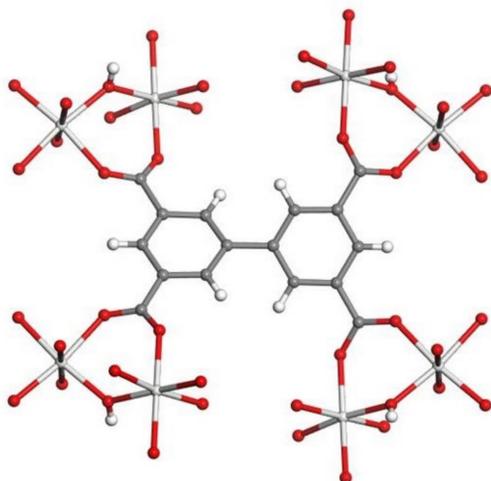


Fig. 2: MFM-300(Sc), [Sc<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub>(L<sup>1</sup>)]

## Métodos utilizados:

- Simulaciones GCMC como componente simple para la adsorción de  $H_2S$  en el MOF MIL-53(Al)-TDC<sup>1</sup> y de  $SO_2$  y de  $CO_2$  en el material MFM-300(Sc)<sup>2</sup>.
- Simulaciones GCMC para la mezcla binaria  $SO_2/CO_2$  (con una composición molar 20:80 respectivamente) en el MOF MFM-300(Sc).
- Los parámetros de los campos de fuerza usados para los MOFs fueron tomados de UFF<sup>3</sup> y DREIDING<sup>4</sup> para la parte inorgánica y orgánica respectivamente.
- Los parámetros para los campos de fuerza para el  $H_2S$ ,  $SO_2$  y  $CO_2$  fueron tomados de los modelos de Kamath *et. al.*<sup>5</sup>, Ketko *et. al.*<sup>6</sup> y TraPPE<sup>7</sup> respectivamente.
- Las cargas de los átomos de los MOFs se calcularon usando el método ESP<sup>8</sup> implementado en Dmol<sup>3</sup> con los funcionales PBE<sup>9</sup> y la base DNP<sup>10</sup>.
- Ciclos de isothermas de adsorción/desorción.
- Curvas de rompimiento.
- Experimentos DRIFT antes y después de la adsorción.

## Resultados:

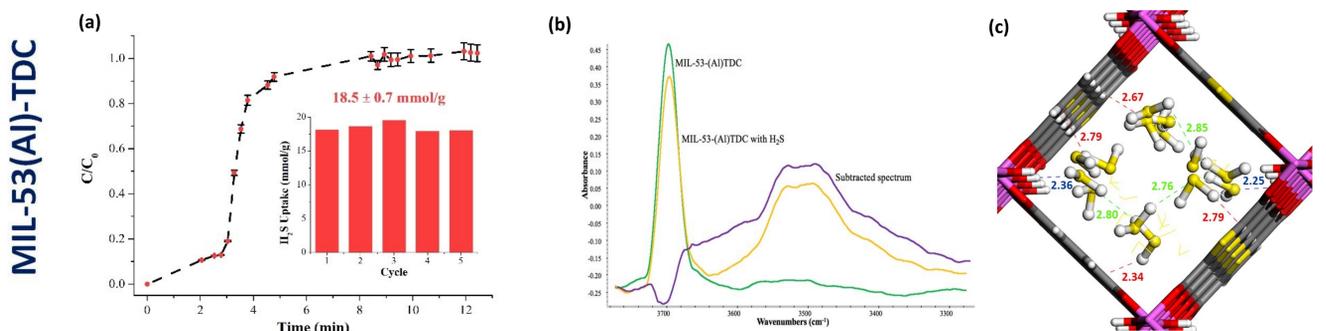


Fig. 3. (a) Curvas de rompimiento de la adsorción de  $H_2S$ , la imagen al interior de la gráfica muestra la adsorción para cada ciclo. (b) Espectro DRIFT (c) Imágenes representativas obtenidas de las simulaciones Monte Carlo.

- ❖ El material mostró una captura de  $18.5 \text{ mmol g}^{-1}$  a una temperatura de 303 K y a 1 bar.
- ❖ Las simulaciones MC exhibieron que las moléculas de  $H_2S$  interactúan principalmente con el átomo de hidrógeno del grupo funcional  $\mu\text{-OH}$  a través de sus átomos de S.
- ❖ Las simulaciones y los experimentos DRIFT asociaron esta interacción a un puente de hidrógeno relativamente débil.
- ❖ El material mostró una gran estabilidad química y una buena reciclabilidad.

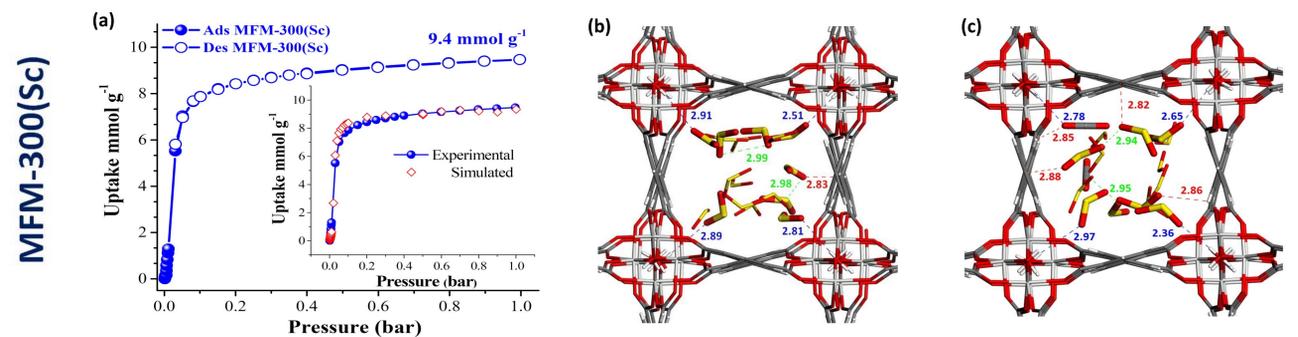


Fig. 4. (a) Isotherma experimental  $SO_2$ , la imagen interior muestra la comparación entre la isoterma experimental y la simulada. (b) y (c) Imágenes representativas obtenidas de las simulaciones MC para el  $SO_2$  y la mezcla  $SO_2/CO_2$  respectivamente.

- ❖ El material mostró una captura de  $SO_2$  de  $9.4 \text{ mmol g}^{-1}$  a 298 K y en un intervalo de presión de 0 a 1 bar.
- ❖ La isoterma simulada exhibió una gran concordancia con la experimental.
- ❖ Las simulaciones MC revelaron que la principal interacción entre las moléculas de  $SO_2$  y el MOF se da vía el átomo de oxígeno del  $SO_2$  y el átomo de hidrógeno del grupo funcional  $\mu\text{-OH}$ .
- ❖ Las simulaciones GCMC para la mezcla binaria  $SO_2/CO_2$  exhibieron que la presencia del  $CO_2$  no cambia significativamente la manera en la que el  $SO_2$  interactúa como componente simple con el material.

## Perspectivas:

- Estudiar la adsorción de  $CO$  y  $CO_2$  en MOFs.
- Utilizar otros MOFs para la adsorción de los 4 gases mencionados.
- Complementar los estudios de Monte Carlo con metodologías de química cuántica.
- Estudiar la factibilidad tecnológica y económica de construir dispositivos para esta aplicación.
- Estudiar la influencia de otros gases en la adsorción de los gases de interés ambiental.

## Posibilidades de colaboración:

- Grupos teóricos: Diseño de modelos para los estudios de adsorción, incluida la reactividad química.
- Grupos experimentales: Interés en probar otros MOFs ya sintetizados para esta aplicación. Síntesis y estudio de MOFs ex-profeso para esta aplicación.
- Economía: Factibilidad económica de construcción de dispositivos prácticos.

## Referencias:

- [1] J. Antonio Zárate Colín, Elí Sánchez-González, Tamara Jurado-Vázquez, Aída Gutiérrez-Alejandre, Eduardo González-Zamora, Ivan Castillo, Guillaume maurin and Ilich A. Ibarra, *Chem. Commun.*, 2019, **55**, 3049.
- [2] J. Antonio Zárate, Elí Sánchez-González, Daryl R. Williams, Eduardo González-Zamora, Vladimir Martis, Ana Martínez, Jorge Balmaseda, Guillaume Maurin and Ilich A. Ibarra, *J. Mater. Chem. A*, submitted.
- [3] A. K. Rappe, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard and W. M. Skiff, *J. Am. Chem. Soc.*, 1992, **114**, 10024.
- [4] S. L. Mayo, B. D. Olafson and W. A. Goddard, *J. Phys. Chem.*, 1990, **94**, 8897.
- [5] J. Kamath, N. Lubna and J. J. Potoff, *J. Chem. Phys.*, 2005, **123**, 124505
- [6] B. H. Ketko, G. Kamath, and J. Potoff, *J. Phys. Chem. B*, 2011, **115**, 4949.
- [7] J. Potoff, and J. I. Siepmann, *AIChE J.*, 2001, **47**, 1676.
- [8] S. Hamad, S. R.G. Balestra, R. Bueno-Perez, S. Calero, A. R. Ruiz-Salvador, *Journal of Solid State Chemistry*, 2015, **223**, 144.
- [9] J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**, 3865.
- [10] W. J. Hehre, J. A. Ditchfield and J. A. Pople, *J. Chem. Phys.*, 1972, **56**, 2257.