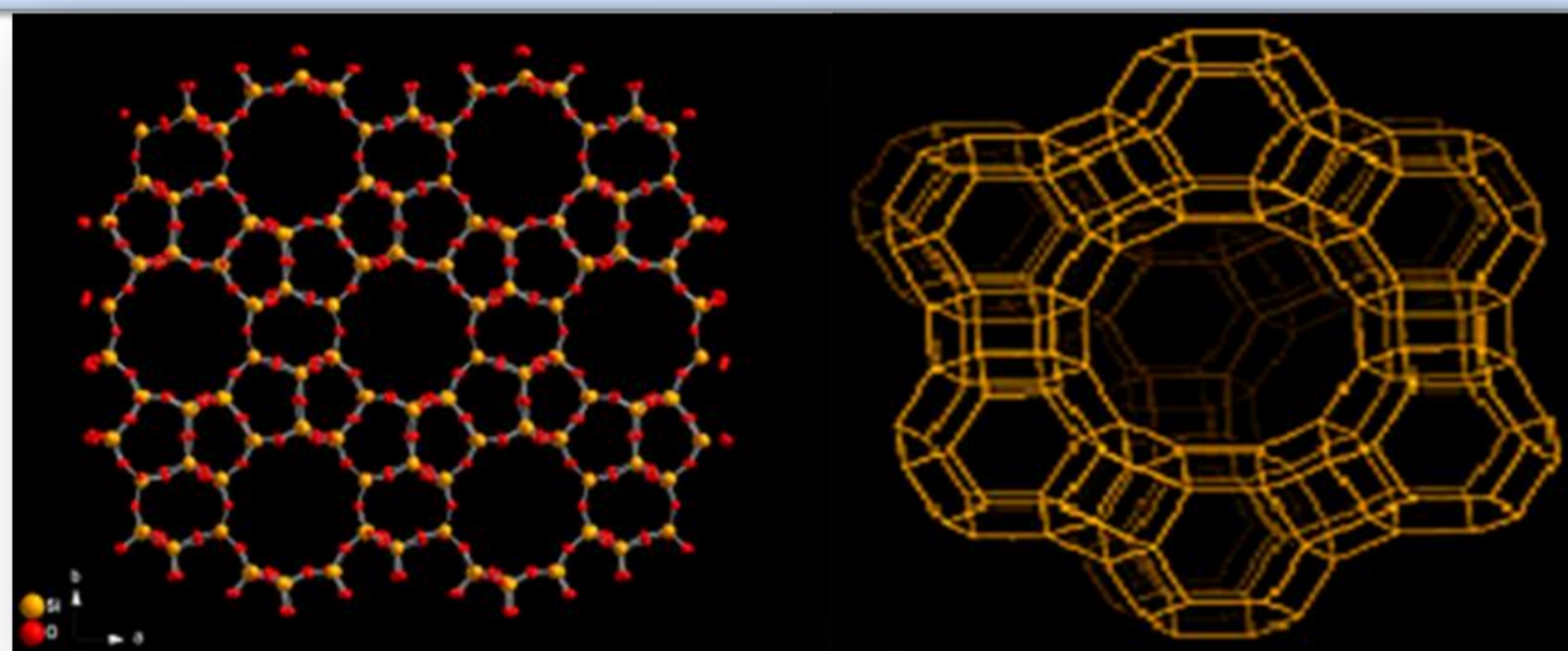


# “Efecto del confinamiento de la solubilidad de sal en agua: Estudio de simulación en zeolita”.

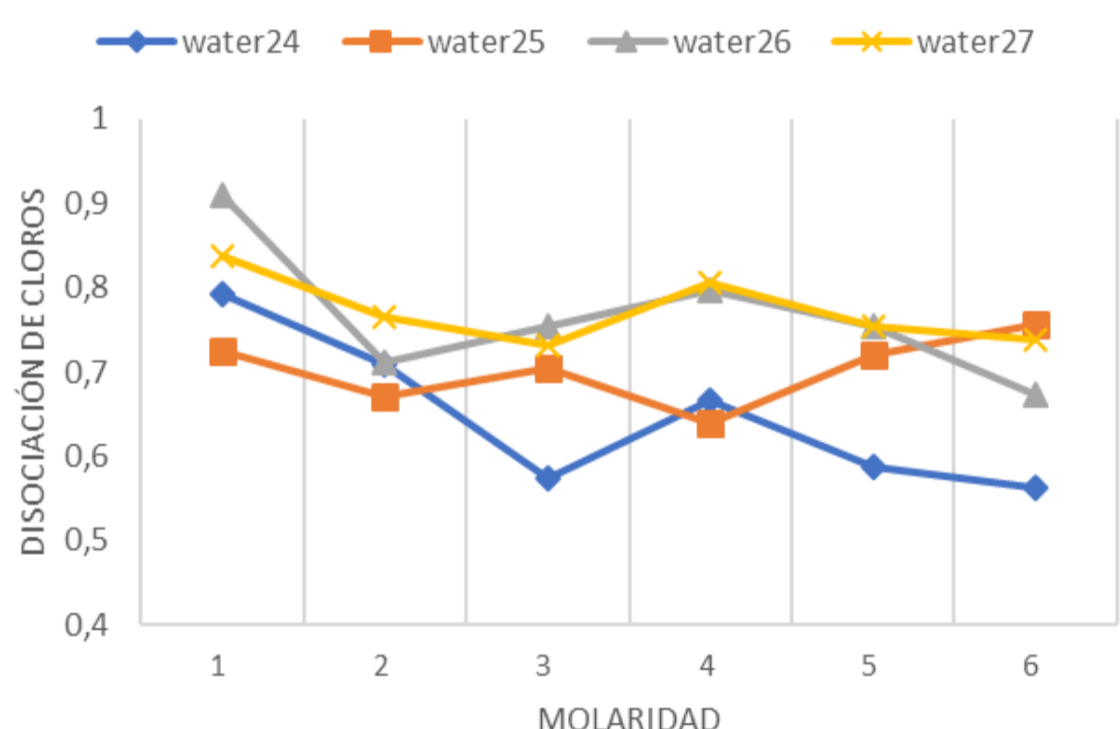
Ramos Carreño, Teresa; Gutierrez Sevillano, Juan José; and Calero Díaz, Sofía.  
Department of Physical, Chemical and Natural Systems / University Pablo de Olavide, 41013 Seville

## Introducción

Existen escasos estudios sobre la solubilidad de las sales en sistemas confinados, y cómo afecta el confinamiento a la solvatación de las sales. Las zeolitas son un grupo de sólidos porosos cristalinos basados en sílice y exhiben una gran área superficial, alta estabilidad térmica y alta capacidad de intercambio. Las zeolitas de sílice pura son hidrofóbicas, pero la presencia de cationes puede cambiar esta naturaleza, lo que las hace adecuadas para una variedad de aplicaciones, como el secado de refrigerantes, la eliminación de contaminantes atmosféricos, la separación de componentes del aire, la recuperación de iones radiactivos de las soluciones de desechos, la catálisis de reacciones de hidrocarburos y muchos otros. En este trabajo, estudiamos la influencia del confinamiento del agua en dos tipos de zeolita sobre la solubilidad del cloruro de sodio. La zeolita MFI y la zeolita FAU.



## Disociación de cloros



## Metodología

Para estudiar la influencia que el confinamiento del agua en las zeolitas tiene en la disociación de los grupos de NaCl, llevamos a cabo la simulación molecular utilizando dos técnicas, los métodos Molecular Dynamics (MD) y Monte Carlo (MC). Todas las simulaciones se realizan utilizando el código de simulación RASPA. Como paso inicial, usamos MD para analizar el efecto de la temperatura y el tamaño del sistema en la disociación de la sal. Luego, el efecto del confinamiento se analiza utilizando simulaciones MC. Para este propósito, calculamos la adsorción de agua en dos zeolitas comerciales (MFI y FAU) y después de obtener la capacidad de adsorción de agua para estas estructuras, estudiamos la disociación de la sal en el agua adsorbida. Nos centramos en el efecto ejercido por el número de cationes en las zeolitas, la topología y la concentración inicial de sal.

## Conclusión

Nuestros resultados muestran que el tamaño de la caja de simulación tiene un impacto en la disociación de iones, obteniendo que cuanto más grande sea la caja, mejor será la disociación. En los sistemas confinados, encontramos que en la zeolita MFI de sílice pura (canales longitudinales conectados a canales en zig-zag) la disociación aumenta y lo mismo ocurre en la zeolita FAU pura (jaulas conectadas a ventanas de tiro). Sin embargo, para la zeolita FAU con átomos de aluminio, la disociación de iones se ve obstaculizada al aumentar el número de sustituciones de Al. Por el contrario, la presencia de aluminio en MFI no altera la disociación de iones.

## Referencias

Dubbeldam, D.; Calero, S.; Ellis, D. E.; Snurr, R. Q., Molecular Simulation 2016, 42 (2), 81-101.

Berendsen, H. J. C.; Grigera, J. R.; Straatsma, T. P. The Journal of Physical Chemistry 1987, 91, 6269-6271

Joung, I. S.; Cheatham, T. E. The Journal of Physical Chemistry B 2008, 112, 9020-904

