



Instituto de Estructura de la Materia - Ciclo de Seminarios 2014-2015
Seminario del Departamento de Física Molecular

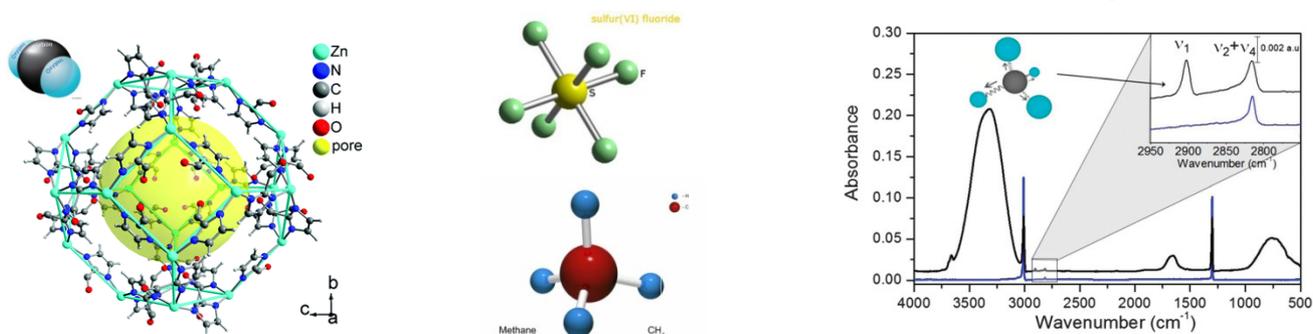
MODELIZACIÓN AB INITIO DE ADSORCIÓN DE GASES DE EFECTO INVERNADERO EN ZEOLITAS (ZIF'S) Y PECULIARIDADES EN SUS ESPECTROS INFRARROJOS

Dr. Vicente Timón
Departamento de Física Molecular
IEM/CSIC

Uno de los retos que la sociedad tecnológica actual afronta dentro de la problemática medioambiental es el de la separación, captura y almacenamiento de gases, tales como el CO_2 , CH_4 o SF_6 que desempeñan un importante papel en lo que se ha dado en llamar el cambio climático. Una de las soluciones más prometedoras consiste en la captura de estos gases sobre materiales adsorbentes porosos, como los llamados metal-orgánicos (MOFs), que tienen estructuras similares a las zeolitas donde el agua tiene un papel primordial y aún bastante controvertido en los procesos de adsorción.

Por otro lado, se ha observado que en hielos de mezclas de baja presión de estos gases y el agua, es activa la vibración de tensión simétrica (ν_1), tanto en el metano como en el hexafluoruro de azufre, vibración prohibida en los espectros infrarrojos de estos gases.

En este seminario se explicará, mediante la utilización de métodos computacionales "ab initio" sobre sistemas atómicos, el proceso de adsorción y el papel que desempeña el agua. Así mismo, se intentará dar una explicación teórica del curioso fenómeno de la activación de la frecuencia ν_1 en el espectro infrarrojo de un hielo metano-agua y se avanzará en el mismo fenómeno en un hielo de hexafluoruro de azufre con agua.



Martes, 5 de Mayo de 2015, 12:00 horas.
Sala de Conferencias. Centro de Física "Miguel A. Catalán".
Serrano, 121. 28006 Madrid.