

Explorando el diagrama de fases de un metal organic framework mediante simulaciones computacionales

Dr. Emilio Méndez

Sorbonne Université, CNRS, Physico-chimie des Electrolytes et Nanosystèmes Interfaciaux, PHENIX, F-75005 Paris, Francia

- **Lunes 25 de noviembre a las 13 hs.**
- **Aula RFP - 3er piso, DQIAQF/INQUIMAE**

Resumen

En este seminario voy a presentar resultados obtenidos en lo que va de mi post-doctorado sobre distintos aspectos de la estabilidad de la Red Metal-Orgánica (MOF por sus siglas en inglés) ZIF-4 (Zeolitic Imidazolate Framework-4). Este material poroso compuesto por cationes Zinc y aniones imidazolato, es un potencial candidato para la captura de dióxido de carbono u otros agentes contaminantes. Se sabe que la estructura del ZIF-4 es sensible a cambios de presión y temperatura, dando lugar a un complejo diagrama de fases en el cual se ubican diversos polimorfos, algunos cristalinos y otros amorfos.¹ En nuestro grupo, liderado por Rocio Semino, estudiamos mediante simulaciones computacionales la estabilidad relativa de cada una de estas fases, además de los mecanismos microscópicos que dan lugar a los cambios de estado observados experimentalmente. Para esto empleamos técnicas de muestreo sesgado, principalmente metadinámica, para acelerar la exploración del espacio de posibles configuraciones, un campo de fuerzas que incorpora la reactividad de las uniones de coordinación², y algoritmos basados en redes neuronales para la identificación automática de las distintas fases presentes en una simulación. Esto nos ha permitido seguir la evolución de transiciones de fase que llevan a la amorfización de ZIF-43, e identificar las rupturas y formaciones de enlace que dan lugar a este proceso. También hemos podido reconstruir el diagrama de fases de ZIF-44, identificando fases que solo aparecen a altas presiones, en particular, una de estas fases no había podido ser ubicada correctamente en el diagrama de fases experimentalmente.