

Simulación de la síntesis y de la amorfización de los MOFs

Dra. Rocío Semino

Profesora asociada en Sorbonne Université e investigadora en el laboratorio PHENIX, París, Francia

- **Lunes 5 de agosto a las 13 hs.**
- **Aula: RFP - 3er piso, DQIAQF/INQUIMAE**
- **Streaming por el canal de [YouTube](#) del DQIAyQF.**

Resumen

En este seminario presentaré los progresos recientes de mi grupo en la simulación multi-escala de la síntesis de un MOF de tipo Zeolitic Imidazolate Framework, formado por Zn^{2+} y ligandos imidazolatos. Para ello, combinamos en una primera etapa una técnica de aceleración de muestreo (metadinámica) con un campo de fuerza atómico reactivo que modela de manera confiable los enlaces de coordinación Zn-ligando y que captura la simetría de coordinación en torno al centro metálico.[1] A continuación, desarrollamos modelos de grano grueso, que nos permiten estudiar el MOF en la escala de la nanopartícula.[2] Nuestras simulaciones nos permiten estudiar el proceso de auto ensamblado desde la polimerización de los primeros metales y ligandos, pasando por la formación de anillos y poros durante la nucleación y llegando hasta el crecimiento de cristales de MOF en solución. Presentaré también nuestros resultados sobre la simulación de transiciones de fase en MOFs que producen polimorfos amorfos. Combinando nuestras simulaciones con un modelo de análisis de redes neuronales hemos podido revelar el mecanismo subyacente a la amorfización de ZIF-4[3] así como completar la topología de su diagrama de fases.[4] Nuestras investigaciones contribuyen a una comprensión fundamental de la síntesis de MOFs que allana el camino para controlar los productos de síntesis de estos materiales.