



de los modos vibracionales, el corrimiento a menores número de onda del estiramiento fuerte del doble enlace del anillo aromático del tolueno adsorbido con respecto a su fase gaseosa. Las mediciones de DSC se realizaron para diferentes cantidades de tolueno incorporadas en dos mordenitas, una de ellas con solo contraiones de  $\text{Na}^+$  y la otra con un 7 % de sustitución por  $\text{Cs}^+$ . La técnica proporciona la energía de desorción y los resultados indican que en principio la incorporación de Cs mejora la capacidad de adsorción de la zeolita.

Se encontró que la mayoría de las situaciones de adsorción ocurren cuando los electrones del anillo aromático pueden interactuar con los contraiones dentro del canal principal. Los resultados obtenidos arrojaron que la  $\text{Cs}_x\text{Na}_{1-x}\text{MOR}$  con  $x=0.25$  es la mejor proporción de intercambio para adsorberse el tolueno. Para mayores concentraciones de cesio debido al impedimento estérico de los cationes, la molécula ve limitado su acceso dentro del canal principal haciendo que la adsorción sea cada vez más débil. Por otra parte, al considerar la corrección de energía dispersiva no se modifica la física básica del proceso de adsorción, aunque si cambia los valores absolutos de las energías de interacción. En el caso de la adsorción de  $\text{CO}_2$ , se agregaron cinco moléculas dentro del canal principal de la MOR intercambiada con sodio y cesio. Se utilizó la misma estrategia de cálculo que en el caso del tolueno para calcular la geometría óptima y las energías de adsorción para las misma mordenitas  $\text{Cs}_x\text{Na}_{1-x}\text{MOR}$ . Se obtuvo que el dopaje  $x=0.25$  favorece de mejor forma la adsorción de  $\text{CO}_2$ . También se observó que al aumentar la concentración de cesio se produce una migración de moléculas de  $\text{CO}_2$  desde el canal principal al canal secundario de ocho miembros, al mismo tiempo que ocurre una reorganización de cationes, los cationes de cesio que se encuentran dentro del canal principal se alinean a lo largo del eje c del canal.

Por otra parte, los experimentos de FTIR junto con las simulaciones de los modos vibratorios aplicados a la adsorción del dióxido de carbono permiten identificar cada una de las vibraciones en el espectro. Se pudo asignar los picos principales del espectro de la molécula adsorbida con la formación de estructuras lineales de  $\text{Cs}^+ - \text{O}-\text{C}-\text{O}$ , vibraciones de los oxígenos de la estructura con los cationes intercambiables, así como los modos propios del  $\text{CO}_2$  puro.

El análisis de estos resultados nos acerca a funcionalizar correctamente las zeolitas y mejorar sus propiedades de adsorción para fines específicos como son las trampas de hidrocarburos, o en la captura de  $\text{CO}_2$  materiales muy frecuentemente usados en la eliminación de contaminantes gaseosos.

## Abstract

### ADSORPTION OF HYDROCARBONS AND CARBON OXIDES ON MICROPOROUS SILICOALUMINATED MATERIALS

This thesis contributes to the understanding of geometries, interaction energies and adsorption capacity of volatile chemicals such as toluene and  $\text{CO}_2$  in zeolites. For this, we worked from the theory with the

modeling of sodium mordenite structures (NaMOR) and with different concentrations of cesium, that is,  $\text{Cs}_x\text{Na}_{1-x}\text{MOR}$  with ( $x= 0.25, 0.50, 0.75, 1.00$ ). The calculations were based on density functional theory (DFT) techniques. A computational study of toluene as an adsorbate in different orientations within the main channel (MC) of zeolite is described, which provided a detailed analysis of the nature of the aromatic-cation chemical bond and adsorption energies including correction for energy dispersive and modes. vibrational. Experimentally, cesium and sodium exchanged mordenites were prepared from a commercial zeolite. Through the adsorption-desorption of  $\text{N}_2$  at 77 K, the surface area and pore volume of each material was measured. And by means of calorimetric measurements (DSC) the energy put into play was analyzed. Finally, by means of FTIR the nature of the adsorption of toluene was studied. In the case of  $\text{CO}_2$  adsorption, five molecules were added in the MC of the mordenites  $\text{Cs}_x\text{Na}_{1-x}\text{MOR}$ . It was found that doping  $x=0.25$  favors  $\text{CO}_2$  adsorption better. The analysis of these results brings us closer to correctly functionalizing zeolites and improving their adsorption properties for specific purposes such as hydrocarbon traps, or in the capture of  $\text{CO}_2$ , materials very frequently used in the elimination of gaseous pollutants.