



## ESTUDIO TEÓRICO DE UN TAMIZ POROSO HIDROXILADO DE GRAFENO PERMEABLE A GASES

EDMUNDO JUAN JOSE SOLIS QUINTANAR<sup>1</sup>, FRANCISCO JOSE TENORIO RANGEL<sup>2</sup>, David Alejandro Velázquez Hernández<sup>3</sup> y <sup>4</sup>

1 CENTRO UNIVERSITARIO DE LOS LAGOS, 2 Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de los Lagos, 3 Centro Universitario de los Lagos, Universidad de Guadalajara. eduardo\_juansolis@hotmail.com

A partir del siglo XXI, las aplicaciones de tamices moleculares en materiales a base de grafeno (MBG) han crecido enormemente, debido a que éstos pueden retener compuestos moleculares en su estructura. Además, el grado de retención en los MBG se puede modificar con la funcionalización del grafeno con grupos hidroxilos, permitiendo el paso libre a ciertas sustancias y reteniendo otras.<sup>1,2</sup> Por otra parte, pese a que se sabe que los MBG presentan propiedades de permeabilidad, se desconoce cómo podrían ser las interacciones en estos materiales y mezclas de metano/mercaptanos que están presentes en el gas natural. El objetivo de este trabajo es evaluar la permeabilidad y retención un tamiz poroso hidroxilado de grafeno en la separación de metano de los mercaptanos mediante simulaciones de Dinámica Molecular.<sup>3</sup> En general, se observó que los mercaptanos presentan una mayor afinidad hacia el tamiz en comparación al metano, lo que produce la retención de los mercaptanos una vez que se ponen en contacto con el material. Además, se vio que el metano presentaba un mayor flujo molecular respecto a los mercaptanos. Estos datos se analizaron mediante la función de distribución radial, el cambio de la fracción molar en la zona del tamiz, el desplazamiento cuadrático medio y el coeficiente de difusión.

### Bibliografía

1. Jiang, D.; Cooper, V. R.; Dai, S. *Nano Lett.* **2009**, 9 (12), 4019–4024.
2. Ersan, G.; Apul, O. G.; Perreault, F.; Karanfil, T. *Water Res.* **2017**, 126, 385–398.
3. van der Spoel, D.; Hess, B. *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* **2011**, 1 (5), 710–715.