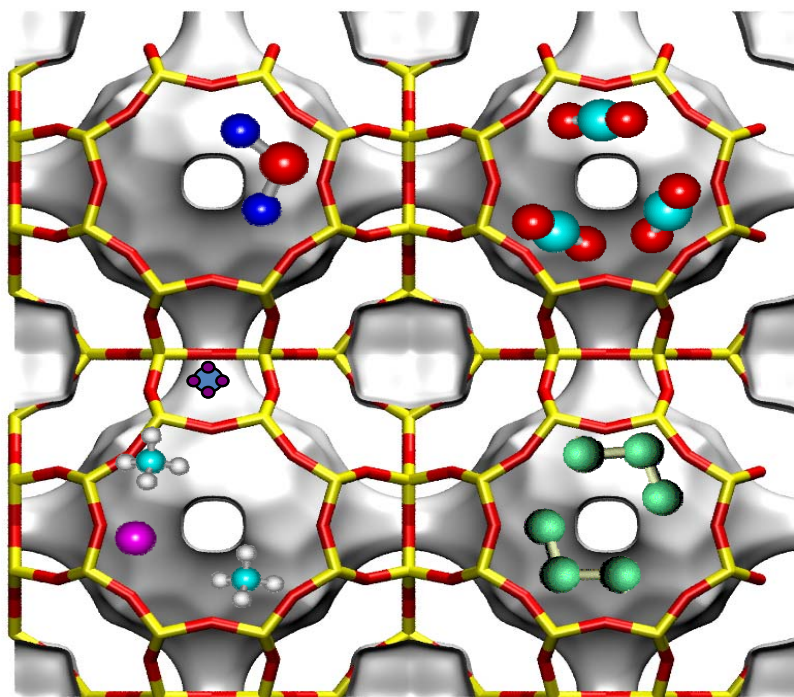


Materiales en Adsorción y Catálisis

Número 2. Octubre 2011

Revista del Grupo Especializado de Adsorción de la RSEQ



Editores

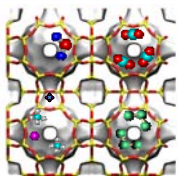
Conchi Ania, Instituto Nacional del Carbón (CSIC), Oviedo.
conchi@incar.csic.es

Sofía Calero, Universidad Pablo de Olavide, Sevilla.
scalero@upo.es

Joaquín Silvestre-Albero, Universidad de Alicante.
joaquin.silvestre@ua.es

Teresa Valdés-Solís, Instituto Nacional del Carbón (CSIC), Oviedo.
tvaldes@incar.csic.es

ISSN:2173-0253



Materiales en Adsorción y Catálisis

Índice

Editorial	4
Artículo Materiales funcionales: de compuestos inorgánicos a polímeros de coordinación. José R. García	5
Espacio Predoc Monolitos de carbón activado, obtenidos a partir de breca de mesofase, para el almacenamiento de CO ₂ . Anass Wahby, Universidad de Alicante.....	12
Artículos Recientes Destacados A new method to position and functionalize metal-organic framework crystals. Nature Communications (2011): 2, 237. Falcaro et al.....	18
Selective CO ₂ adsorption in a flexible non-interpenetrated metal-organic framework. ChemComm (2011) 47, 4258 Kim and Suh.....	19
Reseñas de Congresos IX International Symposium on the Characterization of Porous Solids COPS-IX.....	20
Curiosidades Científicas Los autores de la ecuación de B.E.T.: Teller por José B. Parra (Instituto Nacional del Carbón, Oviedo).....	21
Novedades Tecnológicas	26
Bolsa de Trabajo	27

Editorial

Ha terminado el verano y con el otoño recién estrenado llega el Número 2 de la revista Materiales en Adsorción y Catálisis. Este número sale cargado de la energía, buenas ideas y buenos propósitos que todos siempre traemos después de las vacaciones.

Como ya es habitual en nuestra aún muy joven revista iniciamos el número haciendo un homenaje a algunos de los científicos que han contribuido y siguen contribuyendo de forma relevante a potenciar nuestro campo de investigación. Creemos que la mejor manera de rendir ese homenaje es a través de sus propios escritos. En este número aprenderemos un poco más sobre materiales funcionales haciendo un recorrido que parte de los compuestos inorgánicos y llega hasta los polímeros de coordinación.

No nos olvidamos de los científicos más jóvenes, siempre trabajando duro para encontrar su hueco dentro la comunidad científica. A ellos va destinado nuestro espacio Predoc. También recogemos reseñas de alguno de los artículos recientes

que nos han resultado más interesantes y por supuesto de los congresos que han tenido lugar en adsorción y catálisis en los últimos meses. Cerramos el número con la sección "bolsa de trabajo" en la que colgaremos todas las ofertas de plazas pre y postdoctorales que nos hagáis llegar.

Vamos a terminar esta editorial con un agradecimiento especial al Dr. J. B. Parra por su contribución a la revista con la sección "Curiosidades Científicas". Gracias a él ahora sabemos mucho más sobre la vida y el trabajo que desarrollaron los autores de la ecuación de B.E.T. Brunauer, Emmett y Teller. ¡Ya estamos impacientes por leer lo que nos tiene reservado para los siguientes números!

Esperamos que disfrutéis de este número y os animamos a participar en esta revista con artículos, opiniones, sugerencias y con cualquier otro tipo de contribución que deseéis enviarnos.

El equipo editorial

Artículo

Materiales funcionales: de compuestos inorgánicos a polímeros de coordinación

José R. García

Departamento de Química Orgánica e Inorgánica

Universidad de Oviedo. España

jrgm@uniovi.es

One of the continuous scandals in the physical sciences is that it remains in general impossible to predict the structure of even the simplest crystalline solids from the knowledge of their chemical composition (John Maddox).

Actualmente, uno de los grandes retos en Ciencia de Materiales se encuentra en la fabricación de sistemas con propiedades específicas y controladas. En este contexto, cobra cada vez más importancia el desarrollo de nuevos métodos de síntesis de sólidos, basándose en el conocimiento acumulado en cristalografía, termodinámica y reactividad, y su posterior caracterización química, textural, morfológica y estructural, así como la descripción de sus propiedades (catalíticas, ópticas, magnéticas, electrónicas, etc.).

Después del intenso desarrollo, en la década de los años 1990 [1], de la síntesis y caracterización de nuevas estructuras inorgánicas, más recientemente ha emergido una clase de materiales que se sitúa en la frontera, cada vez más difusa, entre la ciencia de materiales inorgánicos y la química de la coordinación [2]. Se trata de sólidos porosos híbridos organo-inorgánicos, en los que el esqueleto estructural está constituido por unidades inorgánicas que se encuentran funcionalizadas por moléculas orgánicas, enlazadas a la subred inorgánica de forma covalente o iónico-covalente [3]. En ambos grupos de materiales (inorgánicos o híbridos)

se han sintetizando una tremenda variedad de sistemas que han sido investigados tanto química como estructuralmente. Una buena parte de ellos se han obtenido siguiendo procedimientos de síntesis hidrotermal a temperatura moderada (~ 200 °C) y presión autogenerada (10-30 bar) perteneciendo principalmente a familias de óxidos, silicatos y fosfatos. En la mayor parte de los casos, la preparación de estos nuevos materiales ha sido consecuencia de experimentos prueba-error. Sin embargo, si se pretende avanzar eficazmente, resulta necesario introducir aproximaciones racionales a las condiciones de síntesis de materiales determinados, que permitan obtener estructuras con aplicaciones específicas previamente definidas.

El diseño racional de nuevos materiales implica dos etapas. La primera es identificar el tipo correcto de estructura espacial (frecuentemente la estructura cristalina) y la composición química probable que conducirá a la propiedad deseada, lo que implica la construcción de bibliotecas virtuales que incluyan nuevos materiales de composición química aún no descrita, incluyendo todas sus formas cristalinas y no cristalinas más probables, así

como los posibles polimorfos no sintetizados de compuestos químicos preexistentes. La extensión de este objetivo a la pléyade de compuestos que pueblan la imaginación de los científicos lo convierte en una tarea ingente, cuya consecución solamente será posible mediante el esfuerzo cooperativo de multitud de grupos de trabajo.

En la etapa siguiente debe encontrarse el procedimiento para sintetizar el material. Este paso no es trivial ya que, aunque se conozca la composición deseada y su estructura más probable, muy a menudo no es posible encontrar el método experimental correcto para su obtención. En este contexto, es de destacar que los intentos de racionalizar la síntesis, organización y diseño de materiales inorgánicos tienen un origen reciente [4]. Como consecuencia, mientras la química supramolecular de los compuestos orgánicos se ha desarrollado hasta alcanzar la madurez, la química inorgánica supramolecular está actualmente en un estado incipiente, habiéndose conseguido los mayores avances en el área de los sólidos microporosos [5].

El desarrollo de nuevos materiales de porosidad intracristalina está relacionado con la síntesis de los primeros fosfatos de aluminio microporosos con nuevas topologías [6]. Excepto en el contexto de los fosfatos de aluminio y galio, el impacto de estos descubrimientos no fue inmediato, pero la aparición gradual de nuevos materiales de estructura abierta, y composición variada, llevó al convencimiento de que las zeolitas son solamente la punta del iceberg en el campo de los materiales cristalinos intraporosos. A pesar de todo, las aplicaciones de los materiales de

estructura abierta siguen estando dominadas por las zeolitas que, dada su estabilidad, encuentran utilidad en catálisis, técnicas de separación e intercambio iónico; no obstante se están realizando grandes esfuerzos para explotar algunas de las propiedades de los nuevos sistemas descubiertos recientemente. Así, el campo de los materiales inorgánicos de estructura abierta se ha expandido considerablemente en los últimos años. El abanico de posibilidades de estos materiales ya no está limitado a los aluminosilicatos tipo zeolita y a los aluminofosfatos y sistemas relacionados, sino que abarca a más de 40 elementos químicos diferentes que son componentes mayoritarios de compuestos cristalinos microporosos. Entre ellos se encuentran gran número de fosfatos de elementos del bloque p y de metales de transición [7].

Las investigaciones que buscan materiales cristalinos porosos han encontrado dos obstáculos fundamentales que se relacionan con la drástica disminución de la estabilidad del cristal cuando aumenta el tamaño de poro y la tendencia de muchos sólidos a formar dos subredes idénticas interpenetradas por concatenación. Sin embargo, el investigador no debe desanimarse. La síntesis de nuevos compuestos inorgánicos no está limitada por la naturaleza puesto que, hipotéticamente, el número de topologías tridimensionales es infinito [8]. Por el contrario, la etapa limitante radica *solamente* en la creatividad del químico sintético. Aunque son numerosas las nuevas variedades aportadas a las estrategias preparativas, como el uso de disolventes inusuales, la síntesis hidrotermal en presencia de nuevas moléculas plantilla, y el diseño de redes

abiertas mediante ensamblaje molecular [9], quizás sea la síntesis solvotermal mediante irradiación con microondas una de las más atractivas ya que, comparándola con los métodos tradicionales, presenta la ventaja de requerir tiempos de reacción muy cortos, originando partículas de dimensiones nanométricas de tamaño uniforme y alta pureza [10]. Estas ventajas deben ser atribuidas a la rapidez de nucleación, que ha de ser homogénea. Desgraciadamente, la naturaleza precisa de la interacción de las microondas con los reactivos durante la síntesis de los materiales es actualmente incierta y especulativa.

Aunque los procedimientos de síntesis hidrotermal son muy anteriores a las preparaciones utilizando microondas, los mecanismos de formación de materiales cristalinos microporosos en condiciones zeolíticas también son poco conocidos. Sin embargo, experimentos *in situ* de difracción de rayos X sincrotrón, combinados con estudios de NMR, revelan que la formación de fosfatos metálicos en condiciones hidrotermales tiene lugar a partir de unidades fosfato precursoras, previamente formadas en disolución [11]. Esto está de acuerdo con el hecho de que, cuando se observan las estructuras de los compuestos conocidos, se constata que responden a un número limitado de unidades oligoméricas (denominadas SBU, por *secondary building unit*) dispuestas de forma variada. Una hipótesis plausible es que si pueden formarse infinitos sólidos por la conexión de las unidades SBU, éstas deben estar presentes en la disolución de síntesis. Además, su tamaño debe estar controlado por la densidad de carga de la molécula orgánica que sirve de plantilla, por lo

que el papel del elemento metálico presente en la síntesis será secundario. Esta hipótesis abre la puerta a un método de predicción de estructuras inorgánicas periódicas. Es bien conocido el hecho de que la sistematización de las diferentes variedades cristalológicas de los cristales inorgánicos es una tarea difícil que involucra muchos grados de libertad, relacionados con la diversidad química y estructural de las posibles combinaciones. Cualquier manera de reducir el número de grados de libertad es potencialmente valiosa. Una de ellas es el uso de las SBU. Muchas estructuras inorgánicas periódicas pueden ser descritas como unidades elementales y, de una forma más general como SBUs ensambladas en una, dos o tres dimensiones. Las estructuras relacionadas pueden diferenciarse por la forma de interconexión entre las SBUs. Aunque las SBUs han sido usadas habitualmente con propósitos de descripción y caracterización estructural, su explotación como un camino computacional que permita la construcción de modelos hipotéticos ha comenzado a ser desarrollada en un tiempo relativamente recientemente [12]. A partir de esa idea, se puede aplicar una metodología que permita la generación de librerías virtuales de estructuras inorgánicas viables. Por otra parte, el uso de métodos computacionales en el diseño de moléculas orgánicas que actúen como plantilla de nuevas SBUs y que, como consecuencia, generen novedosas arquitecturas inorgánicas es también de gran interés [13].

Por otro lado, en los últimos años se han producido sustanciales avances en la preparación, caracterización y explotación de nanopartículas,

nanotubos y otras unidades y sus ensamblajes [14]. Además, se ha progresado en el descubrimiento y comercialización de nanotecnologías y dispositivos. Los nuevos descubrimientos han tenido un gran impacto en las industrias química, electrónica y espacial, así como en las relacionadas con la energía, encontrándose también aplicaciones en ciencias de la salud y genética [15]. Las propiedades de los materiales con dimensiones nanométricas son significativamente diferentes a las de sistemas convencionales [16], ya que un sólido nanoestructurado puede presentar propiedades que varían como consecuencia, únicamente, de cambios en el tamaño de partícula [17]. Aunque aún es difícil establecer los cambios de propiedades en el sentido teórico, este fenómeno presenta enormes oportunidades para los avances en ciencia y tecnología. El potencial de nuevos materiales basados en su nanoestructura es muy amplio [18]. Entre las propiedades que cambian en condiciones nanométricas se encuentran la posición de las bandas de energía en semiconductores, los momentos magnéticos en materiales ferro- y ferrimagnéticos, los calores específicos, los puntos de ebullición, la química superficial y la morfología.

En los últimos años, se han producido nanopartículas de materiales cerámicos a gran escala empleando métodos tanto físicos como químicos. Además, se han obtenido progresos considerables en la preparación de nanocristales de metales, semiconductores y materiales magnéticos, empleando métodos de la química coloidal [19]. El explosivo crecimiento de la nanociencia y la nanotecnología desde los años 1990 hasta la actualidad ha sido

consecuencia de la aparición de nuevos métodos de síntesis de nanomateriales, así como de herramientas para su caracterización y manipulación.

Un aspecto especialmente interesante de un material es su morfología. Aunque la forma de los cristales de una sustancia sólida es muchas veces espectacular y, en ese caso, suele despertar curiosidad, raramente se considera un factor importante para explicar su comportamiento químico. Sin embargo, la comprensión de muchas propiedades de los materiales cristalinos descansa en el conocimiento detallado de las características de su superficie, íntimamente ligadas a su morfología. Complementando a las imprescindibles técnicas de adsorción física de gases, la difracción de rayos X de superficie puede proporcionar información adicional muy valiosa en este terreno. Cuando la morfología del sistema lo permita, la radiación incidirá de forma rasante para aumentar la contribución de la señal difractada por la superficie respecto a la afectada por todo el volumen. Dado que los haces difractados por la superficie son muy débiles, es conveniente utilizar fuentes intensas como la radiación sincrotrón o los láseres de electrones libres (XFEL). Evidentemente, la elucidación de la estructura molecular de la superficie requiere la interpretación de los haces difractados. La automatización del proceso de determinación estructural de la superficie es un problema de complejidad suficiente para sobrepasar la capacidad de un programa o sistema de programas informáticos convencionales, siendo necesario acudir a técnicas de inteligencia artificial [20], que propician la construcción de sistemas expertos cuyo fin es la dilucidación estructural automatizada, pero preservando la

opción de intervención humana en los diferentes niveles del proceso de resolución, siendo necesario localizar no sólo las posiciones nucleares sino también las interacciones existentes en la superficie, mediante un análisis topológico de la densidad electrónica asociada [21], incluyendo el uso de algoritmos de optimización que permitan la localización de los puntos críticos de la densidad electrónica [22]. En conclusión, el diseño de materiales inorgánicos o híbridos organo-inorgánicos se muestra como un tema de gran vitalidad que ofrece inmensas oportunidades de investigación y transferencia tecnológica [23]. Esta es un área de trabajo verdaderamente interdisciplinar que, al involucrar a científicos con bagajes de conocimiento muy diferentes (químicos, físicos, biólogos, matemáticos, científicos de materiales, ingenieros, y muchos otros), desembocará en la producción de nuevos materiales con posibilidades tecnológicas hasta ahora impensables.

No basta con adquirir la ciencia, es necesario también usarla (Marco Tulio Cicerón).

Referencias

1. A.K. Cheetham, G. Ferey, T. Loiseau, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1999**, 38, 3268.
2. H. Eckert, M. Ward (Eds.) Special issue: Organic-Inorganic Nanocomposite Materials, *Chem. Mater.* **2001**, 13, 3061.
3. C. Janiak, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1997**, 36, 1431; B. Moulton, M. Zaworotko, *Chem. Rev.* **2001**, 101, 1629; M. Eddaoudi, D.B. Moler, H. Li, B. Chen, T.M. Reineke, M. O'Keeffe, O.M. Yaghi, *Acc. Chem. Res.* **2001**, 34, 319; C. Janiak, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **2003**, 2781; O. M. Yaghi, M. O'Keeffe, N.W. Ockwig, H.K. Chae, M. Eddaoudi, J. Kim, *Nature* **2003**, 423, 705; L.G. Qiu, A.J. Xie, L.D. Zhang, L.D. *Adv. Mater.* **2005**, 17, 689; B.L. Chen, N.W. Ockwig, A.R. Millward, D.S. Contreras, O.M. Yaghi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, 44, 4745; R.Q. Zou, H. Sakurai, Q. Xu, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2006**, 45, 2542; D. Sun, S. Ma, Y. Ke, D.J. Collins, H.C. Zhou, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, 128, 3896; J.L. Rowsell, O.M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, 128, 1304; S. Ma, H.C. Zhou, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, 128, 11734; A.G. Wong-Foy, A.J. Matzger, O.M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, 128, 3494; W.J. Rieter, K.M.L. Taylor, W.B. Lin, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 9852; B. Chen, Y. Yang, F. Zapata, G. Lin, G. Qian, E.B. Lobkovsky, *Adv. Mater.* **2007**, 19, 1693; S.S. Kaye, A. Dailly, O.M. Yaghi, J.R. Long, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 14176; X.Q. Song, W.S. Liu, J.R. Zheng, X.L. Tang, H.R. Zhang, D.Q. Wang, *Dalton Trans.* **2008**, 3582; X. Zhu, J. Lu, X. Li, S. Gao, G. Li, F. Xiao, R. Cao, *Cryst. Growth Design.* **2008**, 8, 1897; N. Xu, W. Shi, D.Z. Liao, S.P. Yan, P. Cheng, *Inorg. Chem.* **2008**, 47, 8748; Q. Ye, D.W. Fu, H. Tian, R.G. Xiong, P.W.H. Chan, S.P.D. Huang, *Inorg. Chem.* **2008**, 47, 772; J. Zhang, L. Wojtas, R.W. Larsen, M. Eddaoudi, M.J. Zaworotko, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 17040; L. Hamon, P.L. Llewellyn, T. Devic, A. Ghoufi, G. Clet, V. Guillermin, G.D. Pirngruber, G. Maurin, C. Serre, G. Driver, W. van Beek, E. Jolimaître, A. Vimont, M. Daturi, G. Ferey, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 17490; S. Natarajan, P. Mahata, *Chem. Soc. Rev.* **2009**, 38, 2304; M.J. Prakash, M.S. Lah, *Chem. Comm.* 2009, 3326.
4. D.W. Lewis, D.J. Willock, C.R.A. Catlow, J.M. Thomas, G.J. Hutchings, *Nature* **1996**, 382, 604; D.W. Lewis, G. Sankar, J.K. Wyles, J.M. Thomas, C.R.A. Catlow, D.J. Willock, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1997**, 36, 2675; A.K. Cheetham, C.N.R. Rao, R.K. Feller, *Chem. Comm.* **2006**, 4780.
5. A.K. Cheetham, G. Ferey, T. Loiseau, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1999**, 38, 3268; M.J. Zaworotko, *Nature* **1999**, 402, 242; G. Ferey, A.K. Cheetham, *Science* **1999**, 283, 1125; Y. Sakamoto, M. Kaneda, O. Terasaki, D.Y. Zhao, J.M. Kim, G.D. Stucky, H.J. Shin, R. Ryoo, *Nature* **2000**, 408, 449; C.N.R. Rao, S. Natarajan, A. Choudhury, S. Neeraj, A.A. Ayi, *Acc. Chem. Res.* **2001**, 34, 80; G.D. Stucky, *Nature* **2001**, 410, 885; G. Ferey, C. Mellot-Draznieks, C. Serre, F. Millange, *Acc. Chem. Res.* **2005**, 38, 217.
6. S.T. Wilson, B.M. Lok, C.A. Messina, T.R. Cannan, E.M. Flanigen, *J. Am. Chem. Soc.* **1982**, 104, 1146; M. Estermann, L.B. McCusker, C. Baerlocher, A. Merrouche, H. Kessler, *Nature* **1991**, 352, 320; J.L. Guth, H. Kessler, R. Wey, *Stud. Surf. Sci. Catal.* **1986**, 28, 121; M. Riou-Cavellec, D. Riou, G. Ferey, *Inorg. Chim. Acta* **1999**, 219, 317.
7. K.H. Lii, Y.F. Huang, V. Zima, C.Y. Huang, H.M. Lin, Y.C. Jiang, F.L. Liao, S.L. Wang, *Chem. Mater.* **1998**, 10, 2599; G.Y. Yang, S.C. Sevov, *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, 121, 8389; D.J. Williams, J.S. Kruger, A.F. McLeroy, A.P. Wilkinson, J.C. Hanson, *Chem. Mater.* **1999**, 11, 2241; A.

- Choudhury, S. Neeraj, S. Natarajan, C.N.R. Rao, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2000**, 39, 3091; C.N.R. Rao, S. Natarajan, S. Neeraj, *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 2810; A. Choudhury, S. Natarajan, C.N.R. Rao, *Inorg. Chem.* **2000**, 39, 4295; A. Bhaumik, S. Inagaki, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, 123, 691; N.K. Mal, S. Ichikawa, M. Fujiwara, *Chem. Commun.* **2002**, 112; A.S. Deshpande, N. Pinna, P. Beato, M. Antonietti, M. Niederberger, *Chem. Mater.* **2004**, 16, 2599; C. Ho, J.C. Yu, T. Kwong, A.C. Mak, S. Lai, *Chem. Mater.* **2005**, 17, 4514.
8. J. Klinowski, *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **1998**, 3, 79.
9. S.I. Zones, Y. Nakagawa, L.T. Yuen, T.V. Harris, *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, 118, 7558; R.E. Morris, S.J. Weigel, *Chem. Soc. Rev.* **1997**, 26, 309; P.J. Hagrman, D. Hagrman, J. Zubieta, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1999**, 38, 2638; P. Curnow, P.H. Bessette, D. Kisailus, M.M. Murr, P.S. Daugherty, D.E. Morse, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, 127, 15749.
10. X.C. Xu, W.S. Yang, J. Liu, L.W. Lin, *Adv. Mater.* **2000**, 3, 195; O. Palchik, J.J. Zhu, A. Gedanken, *J. Mater. Chem.* **2000**, 10, 1251; J.J. Zhu, O. Palchik, S.G. Chen, A. Gedanken, *J. Phys. Chem. B* **2000**, 104, 7344.; X.H. Liao, J.M. Zhu, J.J. Zhu, J.Z. Xu, H.Y. Chen, *Chem. Commun.* **2001**, 937.
11. R.J. Francis, S. O'Brien, A.M. Foog, P.S. Halasyamani, D. O'Hare, T. Loiseau, G. Ferey, *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, 121, 1002; F. Taulelle, M. Haoqs, C. Gerardin, C. Estournes, T. Loiseau, G. Ferey, *Colloids Interfaces* **1999**, 158, 229.
12. C.M. Draznieks, J.M. Newsam, A.M. Gorman, C.M. Freeman, G. Ferey, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2000**, 39, 2270; J. Kim, B. Chen, T.M. Reineke, H. Li, M. Eddaoudi, D.B. Moler, M. O'Keeffe, O.M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, 123, 8239; T. Loiseau, C.M. Draznieks, C. Sassooye, S. Girard, N. Guillou, C. Huguenard, F. Taulelle, G. Ferey, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, 123, 9642; G. Ferey, *Science* **2001**, 291, 994; D. J. Tranchemontagne, J.L. Mendoza-Cortes, M. O'Keeffe, O.M. Yaghi, *Chem. Soc. Rev.* **2009**, 38, 1257.
13. D.W. Lewis, D.J. Willock, C.R.A. Catlow, J.M. Thomas, G.J. Hutchings, *Nature* **1996**, 382, 604.
14. S. Iijima, *Nature* **1991**, 354, 56; P.M. Ajayan, O. Stephan, P. Redlich, C. Colliex, *Nature* **1995**, 375, 564; *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology* (Ed., H.S. Nalwa), American Scientific Publishers, California, **2003**.
15. G.R. Patzke, F. Kruimeich, R. Nesper, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, 41, 2446.
16. C.N.R. Rao, A.K. Cheetham, *J. Mater. Chem.* **2001**, 11, 2887; C.N.R. Rao, G.U. Kulkarni, P.J. Thomas, P.P. Edwards, *Chem. Eur. J.* **2002**, 8, 29.
17. E. Lucas, S. Decker, A. Khaleel, A. Seitz, S. Fultz, A. Ponce, W. Li, C. Carnes, K.J. Klabunde, *Chem. Eur. J.* **2001**, 7, 2505.
18. *Nanophase Materials: Synthesis, Properties, Applications* (Eds., G.C. Hadjipanayis, R.W. Siegel), Kluwer, London, **1994**; *Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications* (Eds., A.S. Edelstein, R.C. Cammarata), Institute of Physics, Philadelphia, **1996**.
19. R. Richards, W. Li, S. Decker, C. Davidson, O. Koper, V. Zaikovski, A. Volodin, T. Rieker, *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 4921.
20. Thomas H. Pierce and Bruce A. Hohme *Artificial Intelligence Applications in Chemistry.* **1986**, ACS Symposium Series.; Hugo M. Cartwright, *Applications of Artificial Intelligence in Chemistry*, **1993**, Oxford University Press.
21. R.F.W. Bader, *Atoms in Molecules. A Quantum Theory*, **1990**, Oxford University Press; R.F.W. Bader, *Chem. Rev.* **1991**, 91, 893; Menéndez Velázquez, A. (1999). Tesis Doctoral. Universidad de Oviedo. A. Menéndez-Velázquez & S. García-Granda (2002) *Journal of Applied Crystallography*, 2003, Vol 36, Part 2, 193-205; F. L. Hirshfeld, *Isr. J. Chem.* **1977**, 16, 198.
22. S. Van Huffel and J. Vandewalle, *The Total Least Squares Problem: Computational Aspects and Analysis*, **1991**, Frontiers in Applied Mathematics, Vol 9, Society for Industrial & Applied Mathematics.; S. Van Huffel, Editor, Recent Advances in Total Least Squares Techniques & Errors in Variables Modeling, **1997**, Siam Proceedings in Applied Mathematics Ser.; Vol. 93, Society for Industrial & Applied Mathematics.; S. Van Huffel and Philippe Lemmerling, Editors, *Total Least Squares and Errors-in-Variables Modeling: Analysis, Algorithms and Applications*, **2002**, Kluwer Academic Publishers; G. Oszlanyi, A. Suto, *Acta Cryst. A* **2008**, 64, 123.
23. J. F. Van der Maelen, J. Ruiz, S. García-Granda, *J. Applied Cryst.* **2003**, 36, 4, 1050; A. Menéndez-Velázquez, S. García-Granda, *J. Appl. Cryst.* **2003**, 36, 193; M.A. Salvadó, P. Pertierra, A.I. Bortun, C. Trobajo, J.R. García, *Inorg. Chem.* **2005**, 44, 3512; L. Mafra, F.A.A. Paz, J. Rocha, A. Espina, S.A. Khainakov, J.R. García, C. Fernández, *Chem. Mater.* **2005**, 17, 6287; A. Menéndez-Velázquez, S. García-Granda, *Acta Cryst. A* **2006**, 62, 93; F.Y. Liu, L. Roces, R.A. Sa Ferreira, S. García-Granda, J.R. García, L.D. Carlos, J. Rocha, *J. Mater. Chem.* **2007**, 17,

3696; M.A. Salvadó, P. Pertierra, C. Trobajo, J.R. García, *J Am. Chem Soc.* **2007**, 129; B.F. Alfonso, C. Trobajo, M.A Salvadó, P. Pertierra, S. García-Granda, J. Rodríguez-Fernández, M.T. Fernández-Díaz, J.A. Blanco, J.R. García, *J. Phys.: Condensed Matter* **2008**, 20, 104227; M.A. Salvadó, P. Pertierra, G.R. Castro, C. Trobajo, J.R. García, *Inorg. Chem.* **2008**, 47, 1246; M.A. Salvadó, P. Pertierra, C. Trobajo, J.R. García, *J. Solid State Chem.* **2008**, 181, 1103; L. Mafra, J. Rocha, C. Fernández, G.R. Castro, S. García-Granda, A. Espina, S.A. Khainakov, J.R. García, *Chem. Mater.* **2008**, 20, 3944; M.A. Salvadó, P.

Pertierra, A.I. Bortun, C. Trobajo, J.R. García, *Inorg. Chem.* 2008, 47, 7207; A.I. Orlova, V.Yu.Volgutov, G.R. Castro, S. García-Granda, S.A. Khainakov, J.R. García, *Inorg. Chem.* **2009**, 48, 9046; J.A. Blanco, S.A. Khainakov, O. Khainakova, J.R. García, S. García-Granda, *Phys. Status Solidi C*, **2009**, 6, 2190; Z. Amghouz, L. Rocés, S. García-Granda, J.R. García, B. Souhail, L. Mafra, F. Shi, J. Rocha, *J. Solid State Chem.* **2009**, 182, 3365; Z. Amghouz, L. Rocés, S. García-Granda, J.R. García, B. Souhail, L. Mafra, F. Shi, J. Rocha, *Inorg. Chem.* **2010**, 49, 7917.



José Rubén García nació en Gijón (Asturias) en el año 1958. Es Catedrático de Química Inorgánica en la Universidad de Oviedo, donde también obtuvo su Licenciatura y Doctorado en Ciencias Químicas, en ambos casos con Premio Extraordinario. Sus actividades de investigación se han dirigido a la síntesis y caracterización de materiales inorgánicos e híbridos organo-inorgánicos, con especial atención hacia la síntesis de fosfatos metálicos y sus derivados, con el objetivo general de establecer las características químico-físicas de los nuevos materiales en relación con sus propiedades como adsorbentes, intercambiadores iónicos, conductores protónicos y catalizadores. Ha participado en una treintena de proyectos de investigación financiados en convocatorias competitivas, habiendo publicado alrededor de 130 artículos de investigación originales, buena parte en colaboración con laboratorios de países como Brasil, Francia, Marruecos, Rumania, Rusia, Suecia, Ucrania, UK o USA.

Espacio Predoc... un lugar donde los investigadores predoctorales muestran el resultado de sus investigaciones.

Monolitos de carbón activado, obtenidos a partir de brea de mesofase, para el almacenamiento de CO₂

Anass Wahby

Laboratorio de Materiales Avanzados, Departamento de Química Inorgánica
Universidad de Alicante, Apartado 99, E-03080 Alicante (España), email: wahby@ua.es

El modelo energético actual basado en el uso de combustibles fósiles origina graves problemas tanto económicos como medioambientales. Por una parte, el uso excesivo e irracional de los recursos fósiles, unido a su escasez, está provocando una escalada en los precios del crudo [1]. Por otro lado, el uso de combustibles fósiles para la generación de energía está provocando importantes problemas medioambientales, tales como el cambio climático, cuyas causas se atribuyen principalmente a un aumento progresivo de la concentración de CO₂ en la atmósfera [2-4]. Con el propósito de mitigar estos problemas medioambientales, la comunidad científica internacional está investigando varias opciones, como son el uso de fuentes de energía renovables, la disminución de las emisiones de CO₂ a la atmósfera por medio de su captura (secuestro) y almacenamiento, o su reutilización en procesos industriales. En este contexto, la separación y recuperación del CO₂ presente en corrientes gaseosas emitidas por las plantas de generación de energía a partir de combustibles fósiles, constituye un importante reto tecnológico. Actualmente, la captura de CO₂ se lleva a cabo mediante procesos de absorción química con disolventes básicos, como las aminas. Sin embargo, este proceso implica un alto consumo energético en la regeneración del

disolvente, capacidades limitadas de absorción de CO₂, así como problemas de corrosión [5]. Estudios recientes han demostrado que la adsorción mediante sólidos porosos constituye una alternativa viable para la eliminación y/o captura de CO₂ en estas corrientes gaseosas. Zeolitas, carbones activados, tamices moleculares de carbón (TMCs), sílices mesoporosas y, más recientemente, materiales MOFs ("Metal-Organic Frameworks" o estructuras órgano-metálicas) son los candidatos más prometedores hasta la fecha [6-8]. Dentro de este amplio abanico de adsorbentes, los materiales de carbón presentan ciertas ventajas, como son una elevada superficie específica, alta hidrofobicidad y, lo que es más importante, la posibilidad de diseñar sus propiedades texturales y/o químicas mediante tratamientos pre/post-síntesis [9]. En los últimos años, la necesidad de alcanzar una elevada capacidad de adsorción de CO₂ ha orientado la investigación científica hacia el desarrollo de materiales de carbón con cierto carácter básico, tanto mediante el uso de precursores de carbón ricos en nitrógeno, como mediante la incorporación de grupos amino en la superficie del carbón mediante tratamientos post-síntesis [10]. Por desgracia, dicha modificación representa un coste económico adicional y, en algunos casos, causa problemas en los procesos de

regeneración del adsorbente. Estos problemas se deben a la fuerte interacción que se establece entre las moléculas de CO_2 y los grupos amino, dando lugar a la formación de carbamatos y/o bicarbonatos. En este sentido, resulta interesante desarrollar materiales porosos con elevada capacidad de adsorción de CO_2 , evitando modificaciones post-síntesis.

Paralelamente, las corrientes de gases emitidos por las plantas de generación de energía contienen generalmente, además de CO_2 (3-15 % por volumen), otros compuestos como N_2 (78-80 % por volumen), H_2O (5-7 % por volumen) y O_2 (2-6 % por volumen) [11]. En consecuencia, para que un adsorbente sea efectivo en procesos de captura y almacenamiento de CO_2 , además de tener una elevada capacidad de adsorción debe también ser capaz de separar CO_2 de otros componentes de la mezcla gaseosa. Algo similar ocurre en la purificación del biogás generado en vertederos, en el cual la principal impureza es el CO_2 (hasta un 50 %), que debe de ser adsorbido preferentemente para obtener biometano de alta pureza [12].

Actualmente, los materiales que mejor combinan los requerimientos anteriormente citados son los tamices moleculares de carbón (TMCs) preparados a partir de brea de mesofase. Estos TMCs presentan una elevada capacidad de adsorción de CO_2 y, paralelamente, son capaces de discriminar moléculas de dimensiones muy similares, como son CO_2 (0,33 nm), N_2 (0,36 nm) y CH_4 (0,38 nm) [13]. Otra ventaja que presentan estos materiales frente al resto de sólidos porosos habitualmente utilizados reside en la posibilidad de prepararlos en diferentes formas físicas, tanto en forma de polvo como en forma de monolito, sin

necesidad de añadir un agente ligante. Esta peculiaridad se debe a la capacidad de auto-sinterización que presentan los derivados de brea de mesofase.

Para mostrar las ventajas de estos materiales se compararán, como ejemplo, dos breas de mesofase obtenidas a partir de un residuo de vacío, VR, y un residuo de aceite decantado, AD. Durante el proceso de pirólisis, la reactividad de ambas breas es diferente debido a su distinta composición. La diferencia en reactividad define la viscosidad total de la mesofase, así como su estructura final [14]. Por lo tanto, la estructura de la mesofase depende mucho del tipo de precursor utilizado: AD desarrolla dominios fluidos extensos, mientras que RV da lugar a estructuras de mesofase tipo mosaico [15]. Para la elaboración de ambas breas se seleccionaron, en el presente estudio, condiciones de pirólisis que favorecieran la producción, a partir de cada residuo, de una brea con bajo contenido en mesofase, que consiste principalmente en una baja proporción de esferas de mesofase y con una fase isótropa mayoritaria, y otra con alto contenido en mesofase, compuesta principalmente de mesofase coalescida. La Figura 1 muestra la presencia de grandes diferencias entre ambos residuos para un mismo contenido en mesofase. Las muestras RV-5 y AD-10 son casi isótropas y contienen menos del 10 % de mesofase. Dicho contenido está indicado por el número que acompaña el nombre de la muestra. En ambos casos, la mesofase está constituida por esferas, siendo éstas de mayor tamaño para la brea AD respecto a la RV. Las muestras con mayor contenido en mesofase (AD-88 y RV-93) presentan estructuras de mesofase

coalescida. Las muestras AD presentan estructuras características de dominios fluidos (áreas isocromáticas > 40 μm), mientras que las muestras RV muestran estructuras tipo mosaico (áreas isocromáticas < 10 μm).

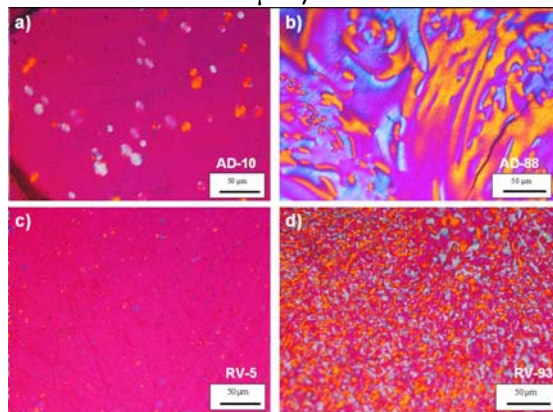


Figura 1. Imágenes de microscopía óptica de luz polarizada para las breas preparadas: a) AD-10, b) AD-88, c) RV-5 y d) RV-93.

En resumen, la selección de breas con diferente microestructura y reactividad (en función de la naturaleza del residuo-precursor de partida y del contenido en mesofase), debe conducir a la obtención de materiales de carbón

Tabla 1. Parámetros texturales de TMCs.

Muestra	S_{BET} ($\text{m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$)	V_0 ($\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$)	V_t ($\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$)	V_n ($\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$)
RV-5-P	3100	1,45/1,02	1,91/1,57	0,85
RV -5-M	2450	1,03	1,12	1,42
RV -93-P	2720	1,21	1,22	1,04
RV -93-M	2895	1,28/1,06	1,64/1,42	0,80
AD-10-mix	2595	1,16/0,93	1,16	1,04
AD -88-P	2445	1,09/0,88	1,35/1,14	0,95
AD -88-M	2660	1,16/1,00	1,16	0,96

Como se ha mencionado anteriormente, diferencias en las características estructurales de las breas conducen a TMCs con diferentes propiedades texturales y, por tanto, diferente comportamiento en la

adsorción de CO_2 . En efecto, los resultados de adsorción de CO_2 (Tabla 2) muestran que los TMCs en forma de monolito presentan mayor capacidad de adsorción de CO_2 , en comparación con las correspondientes muestras en

con diferente estructura porosa, la cual condicionará su comportamiento en el proceso de adsorción de CO_2 . Con el fin de comprobar la influencia que puedan tener las diferencias mencionadas en el proceso de adsorción de CO_2 , se han utilizado las breas RV y AD para la elaboración de tamices moleculares de carbón. Los TMCs han sido preparados mediante activación química de la brea con KOH. Los resultados de caracterización textural de estos TMCs, elaborados tanto en forma de monolito (M) como en forma de polvo (P), (Tabla 1) revelan la presencia de elevados valores de área superficial “aparente”, S_{BET} , superiores a los $3000 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$, junto con volúmenes de microporos estrechos, sugeridos como principales responsables de la adsorción de CO_2 , extremadamente altos (hasta $1,42 \text{ cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$) [14]. Además, se han obtenido muestras con una distribución de tamaño de poros estrecha (ej. RV-93-M y RV-5-M).

adsorción de CO_2 . En efecto, los resultados de adsorción de CO_2 (Tabla 2) muestran que los TMCs en forma de monolito presentan mayor capacidad de adsorción de CO_2 , en comparación con las correspondientes muestras en

forma de polvo, a pesar de que todos los TMCs muestran capacidades de adsorción extremadamente altas. Una comparación entre la cantidad adsorbida en la muestra RV-5-M y en zeolitas tradicionales, como por ejemplo 13X y 5A, indica que el tamiz molecular de carbón supera a las zeolitas a presiones cercanas a presión atmosférica (Fig. 2).

Solamente a bajas presiones las zeolitas superan al material de carbón debido a la presencia de interacciones específicas adsorbato-adsorbente entre la red de zeolita, formada por cationes intercambiables, y la molécula de CO₂ ácida, ya que esta última posee un momento cuadrupolar.

Tabla 2. Capacidad total de adsorción de CO₂ en los diferentes TMCs a 1 bar.

Muestra	Cantidad de CO ₂ adsorbida (mg·g ⁻¹)		
	0 °C	25 °C	50 °C
RV-5-P	236	131	79
RV-5-M	380	185	103
RV-93-P	222	132	77
RV-93-M	242	202	87
AD-10-mix	300	167	101
AD-88-P	272	144	86
AD-88-M	288	207	127

Lo mismo ocurre cuando se comparan los TMCs sintetizados con materiales MOFs, postulados por Yaghi y col. como adsorbentes "superiores" para el almacenamiento de CO₂ a 25 °C [7,8]. En este sentido, la Figura 3 muestra una comparación entre las isothermas de adsorción de CO₂ en las muestras RV-5-M, RV-93-M y materiales MOFs, así como en un carbón comercial con excelentes propiedades adsorbentes (MAXSORB).

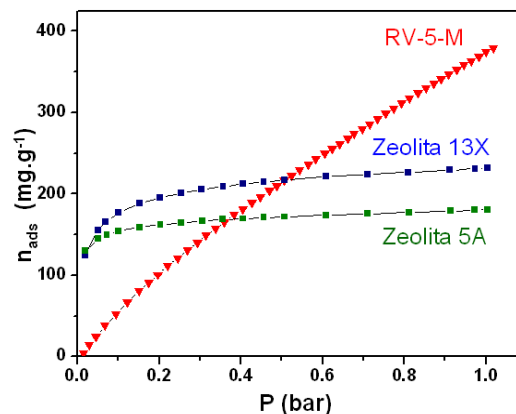


Figura 2. Isothermas de adsorción de CO₂ en RV-5-M y zeolitas 13X y 5A, a 0 °C.

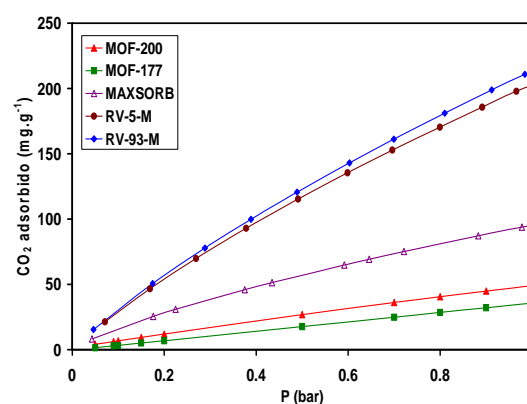


Figura 3. Cantidades de CO₂ adsorbidas en RV-5-M, RV-93-M, MOF-177, MOF-200, y MAXSORB, a 25 °C.

Los tamices moleculares de carbón RV-5-M y RV-93-M no solo superan a los materiales MOFs en cuanto a capacidad gravimétrica (mg·g⁻¹), sino también volumétrica (cm³·cm⁻³) (Fig. 4). En efecto, la cantidad de CO₂ adsorbida en la muestra RV-93-M supera la capacidad de adsorción de los mejores materiales MOFs, tanto a bajas como a elevadas presiones (hasta 50 bar). Este mismo tamiz molecular, además de mostrar una capacidad de adsorción extraordinariamente elevada (500 cm³·cm⁻³), es capaz de adsorber CO₂ de forma selectiva, discriminando moléculas de dimensiones muy similares como son el N₂ y CH₄ (Fig. 5). Por el contrario, los materiales MOFs adsorben CH₄, y por similitud de

tamaño, N_2 , bajo condiciones experimentales similares [7,8]. Los valores de selectividad calculados para la muestra RV-93-M indican que este TMC resulta un adsorbente prometedor para la purificación de gas natural (eliminación de CO_2 en condiciones secas), con un 100 % de selectividad para la separación de CO_2/CH_4 .

En conclusión, los resultados de este estudio muestran que la adecuada selección del precursor de brea, así como de las condiciones de preparación, tanto de brea como de los TMCs propiamente dichos, permite la obtención de TMCs con características optimizadas para la aplicación deseada. De hecho, se ha logrado preparar, TMCs en forma de polvo y monolito a partir de brea de mesofase mediante activación química con KOH.

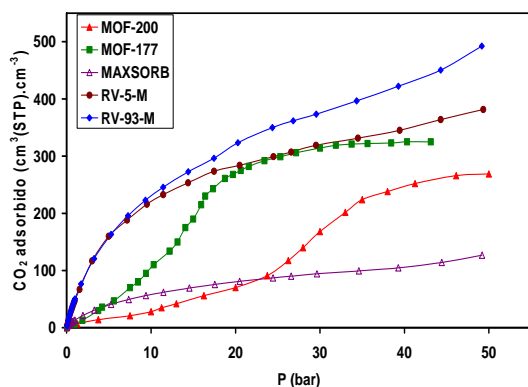


Figura 4. Isotermas de adsorción de CO_2 , ($cm^3 \cdot cm^{-3}$), en los TMCs RV y los MOFs 177 y 200, a 25 °C y presión hasta 50 bar.

Los TMCs sintetizados presentan una excelente capacidad de adsorción de CO_2 , en un amplio rango de presiones que va de 0 a 50 bar, en términos tanto gravimétricos como volumétricos, presentando también cinéticas de adsorción rápidas. Paralelamente, los resultados obtenidos nos han permitido concluir que la presencia de un tamaño de poro óptimo permite conseguir, además de una elevada capacidad de adsorción, una elevada selectividad

hacia el CO_2 frente a moléculas similares, frecuentemente presentes en las emisiones antropogénicas.

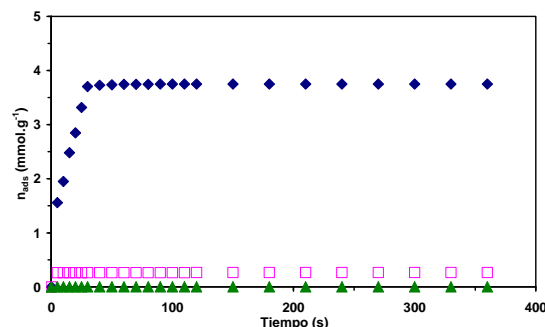


Figura 5. Cinéticas de adsorción de \blacklozenge) CO_2 ; \square) N_2 ; y \blacktriangle) CH_4 a 25 °C en el TMC RV-93-M.

Referencias

- [1] IPCC, the 4th Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge University Press: Cambridge, 2007.
- [2] Karl, T.R.; Trenberth, K.E., Modern Global Climate Change. Science 302 (2003) 1719-1723.
- [3] Keeling, C.D.; Whorf, T.P.; Wahlen, M.; Van der Plichtt, J., Interannual extremes in the rate of rise of atmospheric carbon dioxide since 1980. Nature 375 (1995) 666-670.
- [4] Canadell, J.G.; Le Quéré, C.; Raupach, M.R.; Field, C.B.; Buitenhuis, E.T.; Ciais, P.; Conway, T.J.; Gillett, N.P.; Houghton, R.A.; Marland, G., Contributions to accelerating atmospheric CO_2 growth from economic activity, carbon intensity, and efficiency of natural sinks. Proc. Natl Acad. Sci. USA 104 (2007) 18866–18870.
- [5] Chakravarti, S.; Gupta, A.; Hunek, B., Advanced Technology for the Capture of Carbon Dioxide from Flue Gases, First National Conference on Carbon Sequestration: Washington. DC, May (2001) 15-17.

[6] Chue, K.T.; Kim, J.N.; Yoo, Y.J.; Cho, S.H.; Yang, R.T., Comparison of Activated Carbon and Zeolite 13X for CO₂ Recovery from Flue Gas by Pressure Swing Adsorption. *Ind. Eng. Chem. Res.* 34 (1995) 591-598.

[7] Millward, A.R.; Yaghi, O.M., Metal-Organic Frameworks with Exceptionally High Capacity for Storage of Carbon Dioxide at Room Temperature. *J. Am. Chem. Soc.* 127 (2005) 17998-17999.

[8] Furukawa, H.; Ko, N.; Go, Y.B.; Aratani, N.; Choi, S.B.; Choi, E.; Yazaydin, A.Ö.; Snurr, R.Q.; O'Keeffe, M.; Kim, J.; Yaghi, O.M., Ultrahigh Porosity in Metal-Organic Frameworks. *Science* 329 (2010) 424-428.

[9] Marsh, H.; Rodríguez-Reinoso, F., *Activated Carbon*. Elsevier: Oxford, 2006.

[10] Thote, J.A.; Iyer, S.K.; Chatti, R.; Labhsetwar, N.K.; Biniwale, R.B.; Rayalu, S.S., In situ nitrogen enriched carbon for carbon dioxide capture. *Carbon* 48 (2010) 396-402.

[11] Lee, K.B.; Sircar, S., Removal and Recovery of Compressed CO₂ from Flue Gas by a Novel Thermal Swing

Chemisorption Process. *AIChE J.* 54 (2008) 2293-2302.

[12] Ribeiro, R.P.; Sauer, T.P.; Lopes, F.V.; Moreira, R.F.; Grande, C.A.; Rodrigues, A.E., Adsorption of CO₂, CH₄, and N₂ in Activated Carbon Honeycomb Monolito. *J. Chem. Eng. Data* 53 (2008) 2311-2317.

[13] Breck, D.W., *Zeolite molecular sieves. Structure, chemistry, and use*. Malabar, 637, Krieger RE publishing company: Florida, 1974.

[14] Wahby, A.; Ramos-Fernández, J.M.; Martínez-Escandell, M.; Sepúlveda-Escribano, A.; Silvestre-Albero, J.; Rodríguez-Reinoso, F., High-Surface-Area Carbon Molecular Sieves for Selective CO₂ Adsorption. *ChemSusChem* 3 (2010) 974-981.

[15] Martínez-Escandell, M.; Torregrosa, P.; Marsh, H.; Rodríguez-Reinoso, F.; Santamaria-Ramírez, R.; Gómez de Salazar, C., Pyrolysis of petroleum residues: I. Yields and product analysis *Carbon* 37 (1999) 1567-1582.

Anass Wahby, natural de Tetuán (Marruecos) es licenciado en Ciencias Ambientales por la Universidad Abdelmalek Essaâdi de Marruecos. Inició su actividad investigadora en la citada universidad, bajo la dirección del profesor Rachad El mail, en el área de preparación y caracterización de carbones activados para su utilización como adsorbentes en descontaminación ambiental. Actualmente, realiza su tesis doctoral en el campo de la preparación de carbones activados especiales para almacenamiento de gases bajo la dirección de los profesores Francisco Rodríguez Reinoso, Antonio Sepúlveda Escribano y Joaquín Silvestre Albero. Esta investigación se lleva a cabo en el Departamento de Química Inorgánica de la Universidad de Alicante.



Artículos Recientes Destacados

A new method to position and functionalize metal-organic framework crystals. *Nature Communications* (2011): 2, 237. Falcaro et al.

Es bien conocida la multitud de aplicaciones que poseen los MOFs (*metal-organic frameworks*) en procesos de separación, captura, almacenaje, transporte, sensores y catálisis de moléculas. Para potenciar su interés los autores de este trabajo proponen la introducción de una funcionalidad adicional.

La propuesta consiste en un método sencillo basado en la combinación del uso de micropartículas de fosfato de zinc poli-hidratadas (llamadas DRMs, *Desert Rose Microparticules*) como agentes de nucleación, para lograr un crecimiento controlado de los MOFs, y la introducción de especies activas (metálicas, semiconductoras y poliméricas) que conduce directamente a la fabricación de MOFs apropiados para aplicaciones concretas.

El trabajo se centra en el sonado MOF-5 y demuestra que el uso de las DRMs inorgánicas no sólo conduce a la formación de los MOFs de manera más rápida en solución, sino también posibilita la formación controlada del MOF sobre una superficie química y morfológica. Además las DRMs resultan efectivas para encapsular las especies funcionales añadidas.

El estudio comienza con la optimización post-síntesis del crecimiento del MOF-5 adicionando micropartículas DRMs, esto hace que el tiempo de síntesis sea reducido un 70 % en comparación con los métodos convencionales. Posteriormente los autores realizan diversos experimentos sobre el control espacial del crecimiento del MOF resultado que el MOF-5 puede ser adaptado directamente a sustratos sólidos, ofreciendo nuevas rutas de fabricación de arquitecturas 2D y 3D del MOF-5. Finalmente los autores del trabajo fabrican diversos nanocompuestos funcionales incorporando nanopartículas de metales (Pt y Pd), semiconductores (nano-material CdSe-CdS-ZnS) y polímeros (politetrafluoretileno, PTFE) cualquiera que sea su naturaleza química, encapsuladas en las *Desert Rose Microparticules*.

El uso de estas nanopartículas permite la síntesis de nuevos MOFs de manera sencilla, rápida y con bajo coste, siempre conservando su intrínseca estructura nanoporosa y su calidad. Como prueba de concepto muestran que el compuesto luminiscente puede ser usado para discriminar tiores de diferente tamaño, actuando el MOF-5 como un sensor selectivo de tamaños moleculares.

Elena García Pérez (Univ. Pablo de Olavide)

Selective CO₂ adsorption in a flexible non-interpenetrated metal-organic framework
(*Tae Kyung Kim and Myunghym Paik Suh, ChemComm, 2011, 47, 4258-4260*)

Desde sus orígenes, los metal-organic frameworks (MOFs) han sido objeto de numerosos estudios como adsorbentes en procesos de adsorción, almacenaje y separación de gases, intercambio iónico, catálisis o en la fabricación de nanopartículas metálicas. Otro aspecto interesante es la flexibilidad de estas estructuras, ya que las transformaciones estructurales que se producen, afectan en la habilidad para la captura selectiva de CO₂. En este trabajo los autores presentan un MOF flexible no interpenetrado que coordina moléculas de agua en centros metálicos de cobre (SNU-21) y analizan la influencia del uso de métodos específicos de activación sobre esta estructura.

Los dos métodos de activación que se consideran en este trabajo son el tratamiento con CO₂ supercrítico y la evacuación por calentamiento. Para decidir entre ambos métodos de activación, se han analizado diferentes parámetros como transparencia, cristalinidad, volumen de poro o área superficial. Los autores demuestran

que la estructura activada por tratamiento con CO₂ supercrítico sufre una expansión estructural, por lo que su área superficial y volumen de poro, son mayores que los obtenidos para la estructura activada con evacuación por calentamiento. Además se ha analizado la adsorción de diferentes moléculas, tales como N₂, O₂, H₂, CO₂ y CH₄, observándose que la estructura activada por tratamiento con CO₂ supercrítico adsorbe cantidades mucho mayores de estos gases. Por otro lado se ha comprobado que con este método de activación, la estructura presenta una adsorción selectiva y reversible de CO₂ sobre N₂ a temperatura ambiente, lo que propone dicha estructura como apta para procesos de captura de CO₂.

Por todo esto los autores concluyen que el método de activación con CO₂ supercrítico proporciona una mayor expansión estructural en el MOF, lo que favorece la adsorción de los gases estudiados, así como una adsorción selectiva de CO₂ en mezcla a temperatura ambiente.

Ana Martín-Calvo (Univ. Pablo de Olavide)

Reseñas de Congresos

IX International Symposium on the Characterization of Porous Solids COPS-IX.

Por Conchi Ania (Instituto Nacional del Carbón, Oviedo) y Joaquín Silvestre-Albero (Universidad de Alicante)

La novena edición del simposio internacional sobre caracterización de sólidos porosos (COPS) tuvo lugar el pasado mes de Junio en la ciudad alemana de Dresde. En esta ocasión, Stefan Kaskel (Technische Universität Dresden) actuó como anfitrión del simposio, el cual se celebra cada 3 años, siendo organizado tradicionalmente por los miembros del comité científico internacional.

La ciudad de Dresde, capital del estado de Sajonia y una de las más emblemáticas del país germano por su importancia como centro económico nacional e internacional y la riqueza de su patrimonio arquitectónico (considerado Patrimonio de la Humanidad de la UNESCO entre 2004 y 2009), sirvió en esta ocasión de marco cultural para la celebración del simposio. Ello permitió, a pesar de la climatología, que los conferenciantes pudiéramos admirar el patrimonio arquitectónico que aún se conserva en la ciudad del Barroco, tras haber sido gravemente bombardeada al final de la segunda Guerra Mundial.

En la ceremonia de apertura, Kaskel agradeció la numerosa afluencia de conferenciantes a pesar de la situación económica mundial desfavorable, anunciando que la conferencia contó con la presencia de 259 investigadores de alrededor de 40 países. Merece especial mención el gran número de participantes procedentes de países como USA (25 participantes) y Japón (32 participantes). Siguiendo la filosofía de previas ediciones, en el simposio se abordaron temáticas específicas del empleo de técnicas de caracterización de materiales porosos como zeolitas, materiales híbridos organo-inorgánicos (MOF) y estructuras zeolíticas de imidazol (ZIF), carbones activados, etc., así como las aplicaciones relacionadas con el potencial de los materiales porosos en procesos de captura y separación de gases, almacenamiento de energía, o procesos catalíticos. En esta ocasión se contó con la entrañable participación de Keneth Sing, co-fundador del COPS en el año 1987, con una ponencia acerca de los aspectos históricos sobre el fenómeno de condensación capilar. Sing repasó los artículos pioneros sobre este fenómeno publicados a principios del siglo XIX, así como las teorías de Thomas Young, Pierre Simon Laplace, o William Thomson (conocido posteriormente como Lord Kelvin), algunas de cuyas contribuciones en esta área son todavía vigentes, o han servido de piedra angular para el desarrollo de teorías posteriores. Un ejercicio de memoria histórica muy interesante sobre los primeros trabajos, sin duda de gran importancia para los más jóvenes que a menudo tienden a olvidar las investigaciones menos recientes.

De especial interés fueron las ponencias de Jean Rouquerol (CNRS- Univ. Provence) y Mathies Thommes (Quantachrome Instruments). Rouquerol presentó los resultados del grupo de trabajo de la IUPAC "Liquid intrusion and alternative methods for the characterization of macroporous materials", cuya publicación está prevista en los próximos meses y que resume las alternativas actuales a la utilización de la porosimetría de mercurio para la caracterización de sólidos macroporosos, abordando las limitaciones, ventajas e inconvenientes de un gran número de técnicas de caracterización.

Por otra parte, Thommes expuso de manera resumida los avances del grupo de trabajo constituido por la IUPAC para revisar las recomendaciones publicadas en 1985 sobre el análisis de la porosidad de materiales mediante fisisorción de gases. Este grupo, lleva trabajando desde 2010, revisando la utilización de la fisisorción de gases en la evaluación del área superficial y distribuciones de poros tanto de materiales porosos tradicionales (carbones

activados y zeolitas) como de MOFs, ZIFs y otros sólidos porosos de reciente creación cuyo análisis es más complejo. Este grupo de trabajo aún tiene un largo camino que recorrer, aunque se espera la publicación de las nuevas recomendaciones IUPAC en los próximos 2-3 años.

En la ceremonia de clausura, Stefan Kaskel agradeció de nuevo la participación de todos los asistentes cediendo la palabra a Joaquín Silvestre-Albero (Univ. Alicante) -editor de esta revista-, quien anunció que asumía el relevo generacional en la representación española en el comité científico del COPS, anteriormente representado por el profesor Francisco Rodríguez Reinoso (Univ. Alicante). Silvestre-Albero anunció la celebración de la próxima edición del simposio en Granada, del 11 al 14 de mayo de 2014.

Curiosidades Científicas

Comenzamos esta sección con un acercamiento a tres de los autores más citados en nuestro trabajo, ocultos bajo el acrónimo BET.

Los autores de la ecuación de B.E.T.: Teller

José B. Parra

Departamento de Procesos Químicos en Energía y Medio Ambiente

Instituto Nacional del Carbón (INCAR, CSIC), Oviedo, España

jparra@incar.csic.es

Edward Teller nació el 15 de enero de 1908 en Budapest. Al igual que su colega Brunauer, también pertenecía a la comunidad judía. Sin embargo, aquí acaban las similitudes. Teller nació en el seno de una familia acomodada y culta, en un país perteneciente al Imperio Austro-Húngaro y salvo un accidente de tranvía que sufrió a los 20 años, siempre fue un triunfador nato.

Su prodigiosa inteligencia, con una enorme facilidad para las matemáticas, y su fuerza arrolladora, tanto física como personal, hacen de él un personaje importante, admirado y odiado. Si hacemos una búsqueda rápida en Google, el número de artículos, notas o citas bibliográficas de Brunauer y Emmet no son muy numerosas, mientras que Edward Teller aparece en 166.000 citas; tal es la trascendencia mediática de sus "otras" aportaciones científicas y políticas, que en muchas de estas referencias de Teller se "olvida" su contribución a la Ecuación BET.

Nacido como Ede (Edward en húngaro) de padre abogado y con una madre concertista de piano, Teller estudió en escuelas privadas, excepto cuando la Primera Guerra Mundial se lo impidió. A los 12 años su padre le presenta a Leopold Klug, un viejo profesor de matemáticas que le regala el Álgebra

de Euler. En una entrevista realizada al final de su vida, declararía que este hombre fue el que más influyó en su vida. Le maravilló la simplicidad de las matemáticas y al mismo tiempo su sofisticación. Esto le hizo decidirse a estudiar matemáticas, si bien la desaprobación de su padre le instó a estudiar química -aunque siguió estudiando, además, matemáticas-.

Su padre domina mejor el idioma húngaro y su madre el alemán, por lo que Ede Teller utilizaba de modo indistinto ambos. Su bilingüismo le facilitaría en 1926, a la edad de 18 años, trasladarse a estudiar ingeniería química a Karlsruhe (Alemania), en parte huyendo del antisemitismo imperante en Hungría. En la facultad tiene su primer contacto con la física cuántica en una conferencia de Herman Francis Mark, que le impresiona y en gran manera decide su futuro.

En 1928 se traslada a la Universidad de Munich donde estudiaría física, y el 14 de julio de ese año sufre un accidente cuando se dirigía a la montaña a hacer escalada. Se sube a un tranvía, pero al darse cuenta de que se ha equivocado se baja en marcha y una rueda del tranvía le destroza el pie derecho, y tienen que reconstruírselo. Después de la correspondiente recuperación logra caminar sin prótesis, aunque la utilizará

a veces para seguir practicando deporte (sigue haciendo escalada y es un buen jugador de tenis de mesa).

En 1929 y 1930 se traslada a Leipzig, donde presenta su tesis doctoral dirigida por Werner Heisenberg in 1930, utilizando la mecánica cuántica para calcular niveles de la molécula excitada de hidrógeno. Entre 1929 y 1931 fue Profesor Asociado en la Universidad de Leipzig y entre 1932 y 1933 tiene un puesto equivalente en la Universidad de Göttingen. Con una beca Rockefeller se traslada Instituto de Física Teórica de la Universidad de Copenhague bajo la dirección de Niels Bohr. Durante ese periodo contrae matrimonio con Augusta Maria Harkanyi, a la que había conocido varios años antes. Allí conoce al joven físico ruso George Gamow, que va a ser muy importante en su vida.

Posteriormente, entre 1934-1935 obtiene una beca en el City College de la Universidad de Londres. En ese momento, y desde la llegada del partido Nacional Socialista al poder, Teller se da cuenta de que no hay ningún futuro para un científico judío en Alemania. En 1935 es invitado por George Gamow a trabajar en la George Washington University en Estados Unidos, donde este último trabajaba desde que logró escapar de su país convenciendo a los servicios secretos soviéticos que se iba a un congreso con su secretaria, ¡y también esposa!.

Teller se traslada a Washington donde le ofrecen un puesto como Profesor de Física en la George Washington University, y donde continuará con su brillante carrera de descubrimientos, como la predicción del efecto Jahn-Teller o la Ecuación BET, las reglas del decaimiento radiactivo beta, entre otros muchos.

En esta misma época, en la Universidad de Columbia, Enrico Fermi y Leó Szilárd estaban desarrollando el primer reactor nuclear de fisión nuclear basado en el bombardeo de núcleos pesados con neutrones. Teller obtiene un permiso de la Universidad George Washington para participar en el proyecto de Fermi-Szilárd, aunque como Teller reconocería más tarde, su principal misión era hacer de pacificador. Pero la segunda guerra mundial y en especial el antisemitismo de los regímenes fascistas, los reunió en un objetivo común: que la Alemania nazi no ganara la guerra, para lo cual había que desarrollar la utilización de la energía nuclear para aplicaciones militares; en definitiva, fabricar una bomba atómica. Aunque tenían muchas dudas morales, pues un arma de este tipo solo se podría utilizar contra población civil, la certeza de que Alemania lo estaba intentando y de que el partido nazi no tendría ninguna duda para utilizarla, les decidió a seguir adelante. Para ello, comisionaron a Teller para que convenciera a Albert Einstein de firmar una carta dirigida al Presidente de EEUU Franklin D. Roosevelt del peligro de no adelantarse a los alemanes en la fabricación de armas nucleares. Dicha carta, firmada por todos los citados más Eugene Wigner, fue enviada el 2 de agosto de 1939. Ese mismo año el gobierno estadounidense incrementa el gasto en investigación con objeto de financiar la fabricación de un arma nuclear y el 9 de octubre de 1941 se autoriza el desarrollo del Proyecto Manhattan.

Todos estos acontecimientos cambian completamente la vida de Teller. En ese mismo año obtiene, junto a su esposa, la nacionalidad norteamericana y se entrega de forma total y absoluta a defender a su nuevo país. Durante 1942

se traslada a la Universidad de Columbia para participar como físico teórico, junto con Fermi, en el desarrollo de la bomba. Entre 1942-43 trabaja en el Metallurgical Laboratory de la Universidad de Chicago, y en abril de 1943 se incorpora al Laboratorio Científico de Los Álamos, donde permanece hasta 1946, regresando a la Universidad de Chicago.

En las discusiones previas al diseño de la bomba atómica, Teller siempre defendió la idea de fabricar una "Superbomba" o Bomba Termonuclear de Hidrógeno. Esta idea fue rechazada por Oppenheimer, a favor de la bomba de fisión.

Como Teller manifiesta, en Los Álamos había terminado su metamorfosis, entre el físico teórico apartado del mundo y el científico que trabajaba en temas prácticos y con implicaciones políticas. Y este no cambió a lo largo de su extensa vida.

Al finalizar la guerra, y después de ver los efectos de la bombas de Hiroshima y Nagasaki, sus antiguos compañeros rechazan el desarrollo de armas tan destructivas, mientras que Teller continua abogando por construir la Bomba de Hidrógeno, primero como arma de ataque y más tarde, como arma de disuasión. El 31 de enero de 1950, el Presidente Harry S. Truman autoriza la fabricación de la Bomba-H. El 1 de noviembre de 1952, un año más tarde de que Teller abandonara Los Alamos, hace explosión la primera de estas bombas.

A partir de 1952 Teller se traslada a California, trabajando como Profesor de Física en diferentes puestos y, en particular, en el Lawrence Livermore National Laboratory (del cual fue fundador), primero como consultor (1952-1953), más tarde como director y director asociado (entre 1954 y 1975), y

finalmente como consultor y codirector Emérito a partir de 1975. A partir de 1975 Teller fue nombrado Senior Research de la Hoover Institution on War, Revolution and Peace de la Stanford University y miembro de la White House Science Council entre 1982 a 1986.

La influencia científica de Teller fue enorme y no menor su influencia política. Los sucesos traumáticos ocurridos en los años treinta, con la pérdida de la vida o la emigración forzosa de amigos y familiares a manos de dictaduras comunista o nazi, influyeron notablemente en su ideología y siempre consideró que la defensa de la libertad de la que gozaba en su país de adopción, no permitía ningún tipo de consideración moral. Su enfrentamiento con Oppenheimer y gran parte de los científicos que apoyaron el Proyecto Manhattan, por el desarrollo o no de la bomba de hidrógeno es fundamental para entender el posicionamiento científico durante la guerra fría. Su apasionado apoyo del proyecto "Iniciativa de defensa estratégica", popularmente denominado "Proyecto Guerra de las Galaxias" durante el gobierno de Ronald Reagan fue su último gran empeño. Falleció el 9 de septiembre de 2003 a los 95 años de edad.

La enorme y conflictiva personalidad de Edward Teller quizás se puede resumir en dos notas. Por un lado, el "leit motiv" del Lawrence Livermore National Laboratory con el que tanto tiempo estuvo relacionado "Science and Technology in the National Interest" y por otro la crítica por sus ideas y acciones, que se vuelve despiadada en la película de Stanley Kubrick "Dr. STRANGELOVE, or: How I Learned to Stop Worrying and Love the Bomb" de 1964, en que Kubrick

introduce al Dr. Strangelove, en la que muchos han querido ver una terrible caricatura de Teller. Ese nombre ha pasado a definir el síndrome de la

mano extraña, padecido por personas que han sufrido fuertes traumas cerebrales. Ni Teller perdonaba a sus detractores, ni estos a él.

Novedades Tecnológicas

En el **IX International Symposium on the Characterisation of Porous Solids**, celebrado durante los días 5 al 8 de junio en la ciudad alemana de Dresde, la empresa Bel Japan INC (www.nippon-bel.co.jp) presentó un dispositivo experimental que permite la realización simultánea de isothermas de adsorción de gases a varias temperaturas mientras se registran los difractogramas de rayos X del sólido a medida que se lleva a cabo la adsorción. Se trata de una combinación de varios equipos convenientemente acoplados; el conjunto consta de tres equipos: Un BelSorp, un criostato y un difractómetro de rayos X. La empresa propone la utilización de un BelSorp-max o un BelSorp-mini para la realización de la correspondiente isoterma de adsorción de gases (si bien parece que esta filosofía podría adaptarse a otros equipos volumétricos de adsorción). La muestra se sitúa en un criostato con capacidad para controlar la temperatura entre 50 y 373 K y volúmenes de muestra de 0.15, 0.30 y 0.45 cm³. Esta celda de adsorción se une a través de un tubo de conexión externo al correspondiente adsorptómetro. Así conectada se coloca en el interior de un difractómetro de rayos X, para el que la empresa propone un equipo Ultima IV de la empresa Rigaku, con un intervalo de medida 2θ entre $3\sim 60^\circ$ y un paso mínimo de 0.0001° . La cabeza de la celda de medida tiene unas ventanas transparentes a los rayos X. En la información se presenta la realización simultánea de la isoterma de adsorción de CO₂ a 195 K sobre un sólido (MOF) que presenta cambios en su estructura cristalina durante el proceso de adsorción (Bureekaew, et al. *Angew. Chem. Int. Ed* 2010, 49, 7660). En diferentes puntos de la isoterma, una vez alcanzado el equilibrio de adsorción se registra in situ el difractograma de rayos X, permitiendo analizar el cambio de estructura cristalina con el proceso de adsorción.

En la **5th International FEZA Conference** celebrada entre los días 3 al 7 de julio de 2011 en la ciudad de Valencia, Micromeritics -empresa dedicada al campo de la adsorción- presentó la nueva versión de su Adsorptómetro ASAP 2020 HD. Entre las novedades resaltadas destacan la posibilidad de utilizar dos diferentes transductores de bajas presiones de 1 o 0.1 mmHg de escala con resoluciones máximas de 1×10^{-6} o 1×10^{-7} mmHg. Se destaca el cambio automático de transductor durante el proceso de desorción, utilizando para la medida de las isothermas de desorción a baja presión, el sensor de 10 mmHg de escala, lo que permite tener resultados hasta presiones de 0.05 mmHg ($p/p^0 \approx 6 \times 10^{-5}$ para una isoterma de nitrógeno a 77 K). De esta manera se pueden analizar los cambios de pendiente en las isothermas de muchos MOFs o zeolitas tipo ZSM-5 (entre otros), y diferenciar entre isothermas reversibles o con bucle de histéresis a bajas presiones. También presentan un nuevo sistema de análisis de las propiedades de los gases analizados (Hi-AC, Higher resolution Adsorbed Phase Calculations), basado en la tecnología desarrollada por el National Institute of Standards and Technology que permite utilizar la ecuación de estado del gas real y una compensación dinámica del volumen libre a lo largo de la isoterma. Esto permite, según el fabricante, un análisis más preciso de las isothermas de adsorción de gases y vapores, sobre todo de aquellos que presentan condiciones de análisis muy alejados del gas ideal, como por ejemplo el butano a temperaturas cercanas al ambiente.

Bolsa de Trabajo

El Grupo de Materiales Nanoestructurados con Aplicaciones Tecnológicas (RASPA) de la Universidad Pablo de Olavide, en Sevilla ofrece dos contratos de un año de duración, prorrogables hasta 3 años, para doctores y estudiantes de doctorado.



Postdoctoral Vacancy in Molecular Simulations in Nanostructured materials



This is a multidisciplinary group supported by the ERC through an ERC Starting Grant. Further details on the group are here: <http://www.upo.es/raspa>

Our research interests focus on the study and the design of multifunctional structured materials and complex molecules. We are interested on processes that combined with some kind of control at the molecular level will have far reaching implications, both in basic science and in technological applications

The appointment is for a period of 1 year with a possible extension for another year depending on performance.

Salary is 35.000 Euros gross per year

The candidate will be expected to:

- ✓ conduct research on molecular simulations in porous materials,
- ✓ develop and apply, algorithms, and methods to compute molecular properties in structured materials,
- ✓ produce independent and original research in the area,
- ✓ interact with the other members of the group.

The candidate should have:

- ✓ a PhD in Physics, Chemistry or a closely related discipline,
- ✓ strong background on computer simulations, thermodynamics and statistical mechanics,
- ✓ good knowledge of FORTRAN and C++,
- ✓ excellent communication skills in English and
- ✓ at least four papers published in peer-reviewed international journals

Applicants who do not meet these conditions will not be considered.

Applications (CV and recommendation letters) will be submitted to Sofía Calero (scalero@upo.es). Deadline: 28 October 2011



PhD Vacancy in Molecular Simulations in Nanostructured materials



This is a multidisciplinary group supported by the ERC through an ERC Starting Grant. Further details on the group are here: <http://www.upo.es/raspa>

Our research interests focus on the study and the design of multifunctional structured materials and complex molecules. We are interested on processes that combined with some kind of control at the molecular level will have far reaching implications, both in basic science and in technological applications

The appointment is for a period of 1 year with possible extensions up to three more years depending on performance.

Salary is 20.000-23.000 Euros gross per year

The candidate will be expected to:

- ✓ work in molecular simulations in porous materials,
- ✓ interact with the other members of the group

The candidate should have:

- ✓ Good background in Physics, Chemistry, Chemical Engineering or a closely related disciplines,
- ✓ good knowledge of FORTRAN and C++ and
- ✓ good communication skills in English

Applicants who do not meet these conditions will not be considered.

Applications (CV and motivation letters) will be submitted to Sofía Calero (scalero@upo.es). Recommendation letters are not mandatory, but they will be an advantage

Deadline: 14 October 2011

La doctora Conchi Ania, del Departamento de Procesos Químicos en Energía y Medio Ambiente del INCAR está buscando candidatos para la realización de tesis doctoral, previa solicitud de beca (FICYT, JAE, FPI o similar), en el marco de una beca FPI asociada a un proyecto de investigación del Ministerio de Ciencia e Innovación.

La tesis contempla la preparación de materiales de carbono para su utilización como adsorbentes y catalizadores en procesos foto-asistidos para la degradación de

compuestos persistentes presentes en aguas residuales. Se realizará un estudio exhaustivo de las propiedades estructurales, funcionales y electroquímicas de los materiales de carbono. El doctorando se formará tanto en aspectos experimentales como fundamentales relacionados con los campos de tratamiento de aguas residuales, adsorción y materiales. La investigación a realizar se enmarca en un proyecto de colaboración con varios centros de investigación internacionales, por lo que se contempla la posibilidad de realizar el doctorado europeo.

Requisitos:

Licenciados en Química, Ingeniería Química o Ingenierías de Materiales con expediente académico superior a 1.6 (preferiblemente mayor de 2). Se valorará la motivación para el trabajo experimental y los conocimientos de inglés. Los interesados deberán remitir su CV junto con el expediente académico (o declaración de nota media).

Plazos de presentación: abierto, en función de la publicación de la convocatoria de becas FPI 2012.

Persona de contacto: Dr. Conchi Ania (conchi.ania@incar.csic.es)

Dpto. Procesos Químicos en Energía y Medio Ambiente

Instituto Nacional del Carbón (INCAR)

C/ Francisco Pintado Fe, 26

33011 Oviedo, Asturias

Tel. +34 985 118846

Fax: +34 985 297662

El Dr. Edwin Otten, del Stratingh Institute for Chemistry de la Universidad de Groningen ofrece un puesto de trabajo para estudiantes de doctorado en el campo de síntesis química inorgánica y catálisis.

Project description

The direct use of dioxygen (O₂) in catalytic oxidation processes is a major challenge and is of substantial economic importance in bulk and fine chemical production. In this project, you will develop new early transition metal complexes with redox-active ligands that allow controlled reactivity with O₂. In the initial stage of the project you will study the fundamental aspects of the metal-ligand and metal-O₂ interactions, and how these are modulated by substituent effects. Subsequent application in catalytic oxidation of organic substrates and mechanistic details of these reactions will be studied.

Candidate profile

We are looking for highly motivated individuals (MSc or equivalent degree) with a background in inorganic/organometallic chemistry and catalysis as well as knowledge of analytical techniques that are common in molecular chemistry. Experience in

organic chemistry (ligand synthesis) and an interest in computational chemistry (relating electronic structure to reactivity) is an advantage.

Applications should include a motivation letter, curriculum vitae and references. This material can be sent by email to edwin.otten@rug.nl

website: www.rug.nl/scheikunde/onderzoek/scholen/stratingh/groepen/otten