

Predicción de propiedades de adsorción de MOFs a partir de simulaciones moleculares basadas en Monte Carlo

María Celeste Bernini¹, Marcelo Pasinetti¹, Antonio J. Ramirez-Pastor¹, David Fairén-Jimenez,²
Randall Q. Snurr³

1. Instituto de Física Aplicada (INFAP-CONICET)
2. Department of Chemical Engineering and Biotechnology, University of Cambridge, Pembroke St., Cambridge CB2 3RA, UK.
3. Department of Chemical and Biological Engineering, Northwestern University, Evanston, Illinois, USA

Las simulaciones de Monte Carlo (MC) son una herramienta considerada el *caballo de batalla* para comprender el proceso de adsorción de gases livianos y líquidos en materiales porosos, permitiendo predecir y explicar resultados experimentales de una manera precisa y realista. El creciente desarrollo de códigos de simulación del tipo MC continuo y el avance en la capacidad informática han permitido ir incrementando la complejidad de las moléculas adsorbibles y de los adsorbentes, manejando una descripción a nivel atómico de los mismos.

Sin embargo, la simulación de sistemas adsorbato-adsorbente donde las moléculas adsorbibles son de tamaño medio-grande, resulta mucho más compleja, dado que al alojarse en los canales o poros del material las mismas pueden sufrir un fuerte efecto de confinamiento, con lo cual, es común que el sistema se vuelva frustrado, haciendo más ineficiente el muestreo en el espacio de fases y finalmente dando lugar a un cálculo incorrecto de las cantidades de la fase adsorbida. Por esta razón, se requiere aplicar algoritmos de simulación apropiados, que logren suplir estas dificultades.

En este trabajo se muestra cómo a través del uso de simulaciones moleculares de Monte Carlo, en el ensamble Gran Canónico, empleando algoritmos de “Configurational Bias” o Hyper Parallel Tempering, es posible estudiar la adsorción de fármacos como el *ibuprofeno* (analgésico del grupo de los AINES) y el *busulfan* (anticancerígeno del grupo de los agentes antineoplásicos alquilantes) en materiales cristalinos del tipo Metal Organic Frameworks (MOFs), logrando predecir resultados prometedores antes de llevar a cabo los experimentos en el laboratorio.