

Simulación Molecular para el Estudio de la Adsorción de Gases en Materiales Nanoporosos.
Raúl López.
Dpto. de Física – UNSL. Instituto de Física Aplicada. CONICET.

Los materiales nanoporosos se caracterizan por una alta capacidad adsortiva con respecto a una variedad de gases. Entre ellos se encuentran los carbones activados, los carbones nanoestructurados, los materiales tipo SBA15, MCM41, etc. Estos materiales han protagonizado una brusca expansión en la investigación científica y tecnológica en los últimos años debido fundamentalmente a sus aplicaciones a los procesos de separación de mezclas de gases, de almacenamiento de gases energéticos y, muy especialmente, a la captura y almacenamiento de CO₂, problema crucial en los esfuerzos que se llevan adelante mundialmente con el fin de controlar el cambio climático.

Mediante Simulación de Monte Carlo se modelizan diversas estructuras nanoporosas para contribuir a la caracterización estructural de los sistemas estudiados y a la comprensión a nivel molecular de los procesos fisicoquímicos que se llevan a cabo en dichos sistemas.