



2° Simposio sobre Adsorción Adsorbentes y sus Aplicaciones

ADSORCIÓN DE MEZCLAS CON INTERACCIONES NO-ADITIVAS: SIMULACIÓN Y APROXIMACIONES TEÓRICAS

O.A. Pinto⁽¹⁾, P.M. Pasinetti⁽²⁾, A. Ramirez-Pastor⁽²⁾, F. Nieto⁽²⁾*

⁽¹⁾ LASNE, CITSE-CONICET, UNSE, FayA, Argentina

⁽²⁾ INFAP-CONICET, UNSL, FCFMyN, Argentina

*oapinto@unsl.edu.ar

RESUMEN

En el presente trabajo, la termodinámica de adsorción de mezclas binarias ha sido estudiada por medio de simulaciones de Monte Carlo en la asamblea gran canónica en el marco de un modelo de gas de red. El proceso ha sido monitoreado a través de las isothermas totales y parciales y de los calores diferenciales de adsorción correspondientes a ambas especies. Energías de interacción laterales no-aditivas han sido consideradas, donde la energía de enlace entre un átomo y cualquiera de sus primeros vecinos depende fuertemente del estado de ocupación en la vecindad de dicho átomo. Un interesante comportamiento ha sido observado y analizado en términos de las fases ordenadas a baja temperatura que se forman en el sistema. Finalmente, se desarrollaron para el sistema aproximaciones teóricas de Bragg-Williams y cuasiquímica, cuyos resultados fueron contrastados con los correspondientes a la simulación.

Palabras clave: Adsorción, Simulaciones de Monte Carlo, Mezclas Binarias, Aproximación cuasiquímica.