



2° Simposio sobre Adsorción Adsorbentes y sus Aplicaciones

## ESTUDIOS DE ADSORCIÓN DE NITRÓGENO COMBINANDO ISOTERMAS EXPERIMENTALES Y SIMULACIÓN DE MONTE CARLO PARA OBTENER LA DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑOS DE PORO DE CARBONES TIPO CMK-3

*V. Cornette\*, J.C.A. de Oliveira, D. Barrera, M. Dávila, K. Sapag, R.H. López*

Dpto. de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis- CONICET, Ejército de Los Andes 950, (D5700HHW), San Luis, ARGENTINA

\*[cornette@unsl.edu.ar](mailto:cornette@unsl.edu.ar)

### RESUMEN

*Los problemas energéticos y ambientales han creado la necesidad de diseñar nuevos materiales que puedan ser usados en procesos más eficientes con una elevada selectividad. Los carbones nanoestructurados (CN) han atraído la atención debido a sus propiedades fisicoquímicas, las cuales son útiles en diversas aplicaciones tales como: procesos de separación ( $\text{CH}_4/\text{CO}_2$  y  $\text{N}_2/\text{O}_2$ ), almacenamiento de gases ( $\text{CH}_4$  y  $\text{H}_2$ ), captura de gas ( $\text{CO}_2$ ) y almacenamiento de energía como electrodos de baterías y supercapacitores.*

*En este trabajo, se presenta un modelo molecular realista que permite estudiar carbones mesoporosos nanoestructurados (tipo CMK-3), el cual trata de describir la morfología y topología del poro en una forma más realista. Las simulaciones de adsorción del gas fueron realizadas utilizando el método de simulación de Monte Carlo en la asamblea gran Canónica para caracterizar los carbones ordenados.*

*Los resultados obtenidos muestran un buen acuerdo con la isoterma experimental de nitrógeno a 77K. Este primer paso de vincular la simulación a la síntesis y caracterización de esta clase de materiales es la base para optimizar sus posibles aplicaciones.*

*Adicionalmente, los resultados para la distribución de tamaños de poro fueron comparados con los reportados recientemente por medio del método de QSDFT y NLDFT.*

**Palabras clave:** Adsorción, simulación de Monte Carlo, Carbones nanoestructurados.