

## SIMULACIÓN POR EL MÉTODO MCGC DE ISOTERMAS DE ADSORCIÓN DE N<sub>2</sub> SOBRE MATERIALES MESOPOROSOS SBA-15

M. Ponce <sup>(1)</sup>, J.C.A. de Oliveira <sup>(2)</sup>, R. H. López <sup>(2)</sup>, F. Rojas <sup>(1)\*</sup>

<sup>(1)</sup> Área de Físicoquímica de Superficies, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Unidad Iztapalapa, MÉXICO, 09340 D.F.

<sup>(2)</sup> Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada, CONICET-UNSL, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA.

\*MARAPM22@hotmail.com

### RESUMEN

El método de simulación de isotermas de adsorción por medio del procedimiento Monte Carlo Gran Canónico (MCGC) representa el espacio poroso como una colección de huecos con una forma determinada (e.g. cilindros); en este trabajo se presenta una aproximación a un sólido real con imperfecciones en la superficie interna del poro. Se insertaron moléculas adicionales de SiO<sub>2</sub> sobre la superficie (0.05 y 0.1), con el objetivo de crear una superficie heterogénea y realizar una comparación con un material experimental SBA-15 y poder determinar el mejor ajuste, entre estos dos tipos de datos. El sólido creado es representativo de una isoterma Tipo IV con ciclo de histéresis H1, al igual que el simulado con MCGC (Figura 1). Su Distribución de Tamaños de Poro (DTP) fue calculada a partir de la Teoría de Funcionales de la Densidad No Local (TFDNL). Para este fin se creó un banco de isotermas a 76K, con radios de 1.0 a 8.0nm en intervalos de 0.5nm, para determinar la DTP mediante el método de Mínimos Cuadrados No Negativos con Regularización. Se realizó la comparación de las DTP's entre las isotermas de adsorción del sólido experimental y los obtenidos con MCGC (Figura 2).

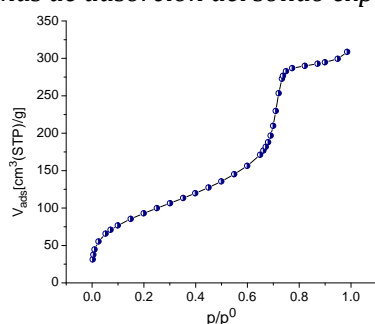


Figura 1. Isotermas de Adsorción de N<sub>2</sub> a 76K del sólido poroso SBA-15 experimental y simulada con MCGC

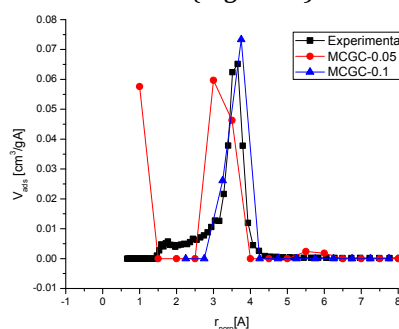


Figura 2. Curvas de DTP de adsorción del sólido poroso SBA-15 experimental y simuladas con MCGC con recubrimiento de moléculas de SiO<sub>2</sub> (0.05 y 0.1)

**Palabras clave:** Adsorción, SBA-15, MCGC, DTP.