



EXPERIMENTOS SOBRE LA INVERSIÓN DE SELECTIVIDAD PARA ETAPAS TEMPRANAS EN LA ADSORCIÓN DE MEZCLAS Ar-CH₄ SOBRE GRAFITO EXFOLIADO (P-62)

M. Rafti^{(1)*}, G.A. Albesa⁽¹⁾, J.L. Vicente⁽¹⁾, A.D. Migone⁽²⁾

⁽¹⁾ INIFTA-UNLP-CONICET, La Plata, ARGENTINA
⁽²⁾ Southern Illinois University, Carbondale (IL), USA

*mrafti@quimica.unlp.edu.ar

RESUMEN

La adsorción selectiva de gases de importancia tecnológica y medioambiental es un tema de gran interés actual. Diferentes sustratos complejos como MOFs y carbones nanoestructurados ofrecen alternativas para su uso en tales operaciones. Para entender la interacción sustrato-adsorbato, comparamos los resultados obtenidos en simulaciones numéricas por Calbi y col. [1], para la adsorción de mezclas Ar-CH₄ sobre grafito exfoliado con experimentos realizados con la técnica volumétrica estática [2]. Se elige este sistema modelo debido a que por su simplicidad permite realizar un análisis libre de efectos secundarios causados por interacciones de los adsorbatos con sólidos porosos más complejos. Como resultado, confirmamos la existencia (predicha en las simulaciones) de un periodo de "overshoot" en donde la concentración superficial del adsorbato con menor energía de interacción con la superficie muestra un exceso con respecto al de mayor, contrario al resultado final esperado y finalmente observado.

Palabras clave: k-meros, Monte Carlo, percolación

Referencias

- [1] J.T. Burde, M.M. Calbi, Journal of Physical Chemistry C 111 (2007), pp. 5057–5063.
[2] M. Rafti, V. Kruglevicute, and A. D. Migone, "Chem. Phys. Lett.", (en prensa) DOI: 10.1016/j.cplett.2012.10.017, 2012.