

Simulaciones Monte Carlo aplicadas al estudio de la adsorción

Albesa, A.G., Rafti, M., Vicente, J.L.

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Dep. de Química,
UNLP, CC 16 Suc. 4, B1904DPI La Plata, Argentina

El objetivo de las simulaciones Monte Carlo (MC) es calcular las propiedades termodinámicas macroscópicas a partir de las configuraciones de muchos estados microscópicos. En estas simulaciones se utiliza un algoritmo completamente estocástico (probabilístico). En este contexto un conjunto es una colección de un número grande sistemas contruidos para ser una réplica del sistema termodinámico de interés. Cada nueva configuración es generada a partir de cambios aleatorios a las posiciones moleculares que son aceptados cuando estos cambios van guiando al sistema hacia el conjunto termodinámico deseado.

En el conjunto gran canónico (μ , V , T), como el número de moléculas no es una variable fija, ésta varía durante el transcurso de la simulación y se puede obtener información acerca del número promedio de partículas en el sistema como una función de las condiciones externas (es decir la presión y composición de la fase gaseosa).

En este conjunto además de que las partículas presentes en el sistema se pueden mover, también se pueden crear y destruir, lo que convierte a este colectivo en algo particularmente útil a la hora de estudiar fenómenos de interfases.

En la presente contribución, repasaremos algunos de los resultados obtenidos para la adsorción gases tales como Metano, Etano, Etileno, Dióxido de Carbono y sus mezclas sobre los siguientes sustratos Grafito, Nanotubos y Carbones Activados.