

Caracterización del material nanoestructurado (CMK-3) por medio de simulación de Monte Carlo

Valeria Cornette

Instituto de Física Aplicada, CONICET - Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco 917,
5700 San Luis, Argentina

Los carbones nanoporosos, debido a sus propiedades superficiales y de estabilidad, son muy atractivos para diversas aplicaciones, tales como adsorción, purificación de agua, catálisis, electroquímica, entre otras. En 1999, la síntesis exitosa de carbones mesoporosos estructurados fue desarrollada [1, 2], en la cual sílicas mesoporosas ordenadas fueron empleadas como moldes (templates) para crear estos materiales. Estos carbones presentan la ventaja, respecto de materiales nanoporosos desordenados, de permitir un control preciso de las dimensiones y distribución de la porosidad, la cual es vital para aplicaciones que requieren selectividad en forma y tamaño, organización jerárquica del material y accesibilidad al poro.

Ryoo y colaboradores sintetizaron un carbón mesoporoso ordenado llamado CMK-3, el cual consiste de arreglos hexagonales (2D) de nanovarillas (nanorods) de carbono. El tamaño de los poros del material sintetizado por Ryoo fue verificado por técnicas de XRD y TEM. Sin embargo, el estudio mediante la adsorción de gases es necesario para un completo entendimiento de las propiedades y estructura del material.

El desarrollo de modelos moleculares avanzados ha llevado a mejorar la caracterización de materiales porosos [4]. La mayoría de las aproximaciones teóricas y de simulación han considerado geometrías simples (poro slit y cilíndricos) para describir la forma de los poros en carbones micro y mesoporosos. Sin embargo, la síntesis de estos nuevos materiales prediseñados requiere el desarrollo de nuevos métodos los cuales tengan en cuenta la morfología específica de estas estructuras.

Con esta motivación, realizamos simulaciones de Monte Carlo en el formalismo gran canónico (GCMC) para caracterizar, mediante la obtención de la distribución de tamaño de poros (PSD), el carbón mesoporoso nanoestructurado CMK-3. A partir de un estudio sistemático modelamos el material partiendo de geometrías simples (poros slit, poros cilíndricos) y combinación de éstas avanzando hacia un modelo geométrico más apropiado [5], el cual permite una mejor caracterización del material. Los resultados obtenidos son contrastados con cálculos de QSDFT y NLDFT (considerando las geometrías slit y cilíndrica) y datos experimentales [6].

- [1] Ryoo, R.; Joo, S. H.; Jun, S. J. *Phys. Chem. B* 1999, 103, 7743.
- [2] Lee, J.; Yoon, S.; Hyeon, T.; Oh, S. M.; Kim, K. B. *Chem. Commun.* 1999, 2177.
- [3] Choi, M.; Ryoo, R. *Nature materials* 2003, 2, 473.
- [4] Gor, G.; Thommes, M.; Cychoz, K.; Neimark, A. *Carbon* 2012, 50, 1583.
- [5] Solovyov, L.; Shmakov, A.; Zaikovskii, V.; Joo S.; Ryoo, R. *Carbon* 2002, 40, 2477.
- [6] Barrera, D.; Dávila, M.; Cornette, V.; De Oliveira, J.C.A.; López, R.H.; Sapag, K.; *Microporous and Mesoporous Materials*; 2013, 180, 71.