

## ¿Por qué estudiar adsorción con ocupación multisitio?

M. Dávila

Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Lu s,  
CONICET, 5700 San Lu s, Argentina

Cuando una mol cula se adsorbe puede ocupar uno o m s sitios de adsorc n. Cuando ocupa m s de uno se dice que la ocupaci n es multisitio. En sistemas en los que puede ocurrir esto, es importante utilizar teor as que consideren la m ltiple ocupaci n de sitios, debido a que existen efectos que no pueden explicarse de otra manera [1,2].

Se presentar  algunas teor as obtenidas a partir de la mec nica estad stica. Se tendr  en cuenta mol culas lineales adsorbidas sobre superficies bidimensionales prestando especial atenci n a sistemas en los que las mol culas adsorbidas sufren interacciones laterales. Se comenzar  con aproximaciones para la adsorc n de gases puros [3-5] y se finalizar  con los  ltimos resultados obtenidos para la adsorc n de mezclas.

[1] Surface area measurements with linear adsorbates: an experimental comparison of different theoretical approaches. D. S. Rawat, A. D. Migone, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, and F. J. Rom . *Langmuir* 2009, 25(16), 9227–9231.

[2] Exact statistical thermodynamics of alkane binary mixtures in zeolites: New interpretation of the adsorption preference reversal phenomenon from multisite-occupancy theory. M. D vila, J.L. Riccardo, A.J. Ramirez-Pastor, *Chemical Physics Letters* 477 (2009) 402–405.

[3] Quasi-chemical approximation for polyatomics: statistical thermodynamics of adsorption, M. D vila, F. Rom , J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, *Surface Science*, 600 (2006) 2011–2025.

[4] Fractional statistical theory and use of quasi-chemical approximation for adsorption of interacting k-mers. M. D vila, J.L. Riccardo, A.J. Ramirez-Pastor, *Surface Science* 603 (2009) 683–689.

[5] Phase behavior of attractive k-mers on two-dimensional lattices: a study from quasi-chemical approximation. P.Longone, M. D vila, J. L. Riccardo and A. J. Ramirez-Pastor, *Adsorption* 19, 509-519 (2013).