

## UN NUEVO MÉTODO PARA OBTENER LA DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE MESOPOROS UTILIZANDO LA ECUACIÓN DE KELVIN

**Jhonny Villarroel-Rocha**, Deicy Barrera y Karim Sapag

Actualmente, los materiales mesoporosos ordenados tienen una fuerte influencia sobre procesos de *adsorción* y *catálisis*, fundamentalmente por el ordenamiento en su estructura y sus *tamaños de poro* definidos. Entre estos materiales se encuentran, los que presentan (o son similares) mesoporos de geometría: *i) cilíndrica*, tales como, MCM-41, SBA-15 y CMK-3; y *ii) esférica*, tales como, SBA-16 y KLE. Las *propiedades texturales* de estos materiales, por lo general, son obtenidos a partir de isothermas de adsorción-desorción de  $N_2$  a 77 K, donde la *ecuación de Kelvin* es generalmente utilizada para estimar el *tamaño de los mesoporos* que presenta el material. La ecuación de Kelvin es considerada válida por la teoría de condensación capilar y es usada por varios métodos macroscópicos para la evaluación de la distribución de tamaño de poros (PSD, por sus siglas en inglés), entre ellos el método de Barrett, Joyner y Halenda (BJH). Sin embargo, ha sido encontrado que los métodos clásicos, que utilizan la ecuación de Kelvin, para el análisis de la PSD, subestiman el tamaño de poros (hasta en un 25 %) en materiales que presentan tamaño de poros menores a 10 nm.

En este trabajo, la PSD de diferentes materiales mesoporosos ordenados fue evaluada mediante isothermas de adsorción-desorción de  $N_2$  a 77 K, utilizando un método macroscópico mejorado (*método VBS*, propuesto por Villarroel-Barrera-Sapag, 2011). Este método, está basado en el algoritmo de BJH y propuesto para poros de geometría cilíndrica y esférica, el cual ha sido mejorado por medio de una modificación a la ecuación de Kelvin con la adición de un término de corrección ( $f_c$ ), y además considera mecanismos apropiados de condensación/evaporación capilar. Este método es autoconsistente ya que para obtener el término de corrección final, se construyeron isothermas simuladas con diferentes valores de  $f_c$  hasta lograr un ajuste con la isoterma experimental. Los resultados obtenidos por el método VBS se compararon con el método de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), encontrando un buen acuerdo entre ellos.