



2° Simposio sobre Adsorción Adsorbentes y sus Aplicaciones

## CONDENSACIÓN CAPILAR Y DESORCIÓN EN NANOPOROS, INFLUENCIA DE LA HIDROFILICIDAD

*M. Factorovich*<sup>(1)\*</sup>, *V. Molinero*<sup>(2)</sup>, *Damian Scherlis*<sup>(1)\*\*</sup>

<sup>(1)</sup> Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física Universidad de Buenos Aires

<sup>(2)</sup> Department of Chemistry, University of Utah

\*[matiasf@hotmail.com](mailto:matiasf@hotmail.com)

\*\*[damian@qi.fcen.uba.ar](mailto:damian@qi.fcen.uba.ar)

### RESUMEN

*Se presentan resultados de simulaciones híbridas de Dinámica Molecular-Monte Carlo Gran Canónico que reproducen isotermas de adsorción-desorción de agua en poros cilíndricos infinitos con diferentes niveles de hidrofiliidad. La hidrofiliidad está definida de acuerdo al ángulo de contacto generado en la simulación de una gota de agua sobre una superficie plana (1). Tanto el poro como el agua en nuestras simulaciones son representados por el modelo de agua monoatómica mW (2).*

*Hemos encontrado que el fenómeno de condensación capilar tiene lugar a una densidad sobresaturada que se encuentra en excelente acuerdo con simulaciones anteriores en NVT(3)(4) realizadas por nuestro grupo. La desorción se produce fuera de equilibrio para el caso de poros llenos, o en equilibrio si existe una interfaz líquido vapor. En particular la presencia de una interfaz se corresponde mejor con las condiciones experimentales reales.*

*Para poros de baja hidrofiliidad existe una relación lineal entre el ángulo de contacto, y la presión de desorción, como la predicha por la ecuación de Kelvin, pero se empiezan a notar desviaciones para ángulos de contacto muy pequeños.*

*A su vez analizamos cómo la funcionalización introducida según diferentes patrones geométricos, afecta la presión de desorción de nuestros sistemas. Encontramos comportamientos no lineales entre el grado de funcionalización y las presiones de desorción.*

**Palabras clave:** capillary condensation, simulation, Molecular dynamics - Grand Canonical

### Referencias

- [1] Giovambattista, N.; Debenedetti, P. G.; Rosky, P.J. J. Phys. Chem. B 2007, 111, 9581
- [2] V. Molinero and E. B. Moore, J. Phys. Chem. B 113,4008(2009)
- [3] de la llave, E ;Molinero, V; Scherlis, D A J. Chem. Phys. 2010, 133, 34513.
- [4] de la llave, E ;Molinero, V; Scherlis, D A J. Chem. Phys C. 2012, 116,1833-1804