



2° Simposio sobre Adsorción Adsorbentes y sus Aplicaciones

COMPORTAMIENTO CRÍTICO DE SEGMENTOS LINEALES ADSORBIDOS SOBRE UNA RED

D.A. Matoz-Fernandez⁽¹⁾, D.H. Linares⁽¹⁾, A.J. Ramirez-Pastor⁽¹⁾*

⁽¹⁾ Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis CONICET, San Luis, Argentina.

*:fdmatoz@unsl.edu.ar

RESUMEN

La adsorción de moléculas poliatómicas ha tenido un impacto notable en ciencia e ingeniería, manteniendo un continuo crecimiento en cuanto a desarrollo tecnológico se refiere. Esto ha generado la necesidad de conocer los mecanismos elementales involucrados en tal proceso, y en consecuencia, ha motivado el desarrollo de numerosos modelos teóricos y simulaciones computacionales (principalmente simulación de Monte Carlo y dinámica molecular). La información más básica que se puede obtener de un fenómeno de esta naturaleza es la isoterma de adsorción. La misma representa el número de moléculas depositadas sobre la superficie en función de la presión o el potencial químico. En este sentido, una de las contribuciones teóricas más tempranas fue desarrollada por Langmuir [1], quien obtuvo la isoterma de adsorción exacta para un gas de red de monoómeros, dejando así las bases para nuevas teorías que incluyeran el carácter poliatómico de las moléculas de adsorbato. Entre estas últimas teorías, se destacan las aproximaciones de Flory-Huggins [2] y la de Guggenheim-Di Marzio [3], las cuales suponen una distribución isotrópica para las cadenas adsorbidas. Por otro lado, estudios más detallados, realizados mediante simulación de Monte Carlo, han mostrado fuerte evidencia numérica sobre la existencia de una transición de fase isotropico-nemático a cubrimientos intermedios y grandes tamaños de las moléculas de adsorbato. Esto abre una pregunta interesante: ¿Como influyen los efectos anisotrópicos en el mecanismo de adsorción?. En el presente trabajo intentamos responder este interrogante, mediante el desarrollo de un nuevo modelo teórico para la adsorción de moléculas poliatómicas, en el cual es posible introducir los efectos orientacionales observados en las simulaciones computacionales.

Palabras clave: Adsorción, Moléculas Poliatómicas, Anisotropía, Teoría.

Referencias

- [1] Langmuir, I. J. Amer. Chem. Soc. 40,1368 (1918).
- [2] Flory, P J. Chem. Phys. 10, 51 (1942); Huggins, M. J. Phys. Chem. 46, 151 (1942)
- [3] Guggenheim, E. A. Proc. R.Soc. London A183, 203 (1944); Di-Marzio, E. J. Chem. Phys. 35, 658 (1961).