

SIMULACIÓN DE NITRÓGENO ADSORBIDO DENTRO DE CARBONOS POROSOS

MARTA BLADÉ BLADÉ

Departament d'Enginyeria Química, Universitat Rovira i Virgili
Tarragona 43007, Espanya

Introducción

Los materiales porosos se utilizan en muchas ramas de la ciencia y la tecnología, por ejemplo, se usan como catalizadores, en la separación de mezclas, en la purificación de fluidos, y en la fabricación de membranas. Su aplicación adecuada requiere de la caracterización precisa de sus propiedades superficiales y estructurales, además del conocimiento del comportamiento fisicoquímico de los fluidos cuando se encuentran dentro de los poros. La adsorción de gases, y más concretamente la del nitrógeno a 77 K, se emplea para estudiar las propiedades de sólidos porosos, como el diámetro y el volumen de poro.



Métodos

Monte Carlo: A partir de números aleatorios y distribuciones estadísticas se calculan promedios de propiedades termodinámicas del sistema microscópico, que corresponden a las propiedades macroscópicas.

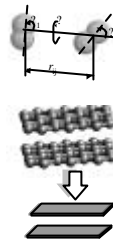
Ensemble Gran Canónico: Se fijan las condiciones de temperatura, volumen y potencial químico, y se considera que el gas adsorbido está en equilibrio con el gas del exterior (misma temperatura y potencial químico). En este ensemble se permite que el número de partículas, dentro del poro, fluctúe durante la simulación.

Modelos

Para determinar las isotermas se usó el modelo de Vabec, et al (2CLJQ) para el nitrógeno, con los parámetros de la referencia [1].

El poro de carbón se consideró como placas paralelas homogéneas e infinitas, usando el modelo de Steele.

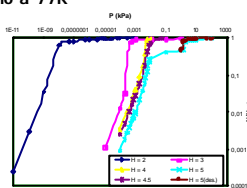
La interacción entre una molécula de fluido y la pared del adsorbente se representan por el potencial 10-4-3 de Steele [2].



Isotermas de adsorción/desorción

Nitrógeno a 77K

¿Para $H=5?$ se observa histéresis y un salto a presiones altas que indica condensación capilar
¿Para poros con $H>2?$ se observa un cambio de pendiente en la isoterma a presiones bajas.

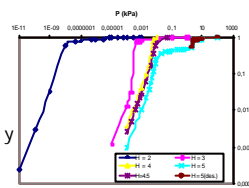


Fluido sin cuadrupolo a 77K

Las isotermas son muy parecidas a las del N_2

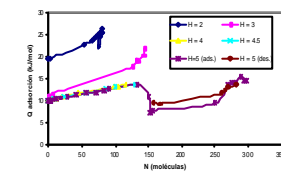
No hay histéresis para $H=5?$, pero sí un salto a altas presiones.

Los cambios de pendiente y saltos ocurren a presiones más altas que para N_2 .

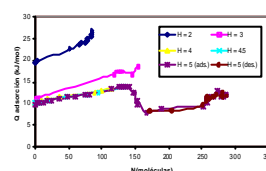


Calor de adsorción

Nitrógeno a 77K



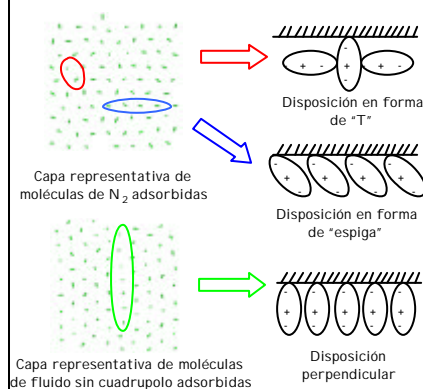
Fluido sin cuadrupolo a 77K



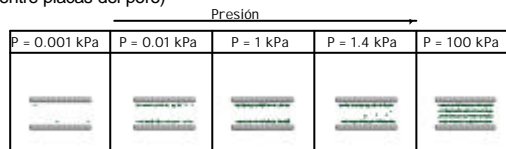
A bajas presiones (donde $N < 150$) el calor de adsorción aumenta con el número de moléculas, indicando la contribución de la interacción entre moléculas vecinas.

A altas presiones (donde $N > 150$) el calor de adsorción es mayor para el nitrógeno que para la molécula que no tiene cuadrupolo indicando la importancia del cuadrupolo a estas condiciones.

Propiedades estructurales



Visualización del poro tamaño $H = 5s$ ($s = 0.33211$ nm y H distancia entre placas del poro)



Si aumenta el tamaño de poro aumenta el número de capas adsorbidas.

Para el N_2 , a altas presiones el son favorables las disposiciones en forma de "T" y de "espiga".

Para el fluido sin cuadrupolo se observa mayor número de moléculas perpendiculares a la superficie.

Conclusiones

A pesar de la semejanza en las isotermas y calores de adsorción del N_2 y el fluido sin cuadrupolo, las propiedades estructurales son diferentes, por lo que es necesario ser cauteloso al representar N_2 como una molécula esférica sin cuadrupolo. Por lo tanto, las teorías desarrolladas para describir adsorción de fluidos en medios confinados que se basan en la adsorción de moléculas esféricas simples, y se aplican a bs resultados experimentales de adsorción de nitrógeno, no siempre pueden ser válidas.

Es decir, que para poderlas aplicar se tendría que utilizar otro fluido, de moléculas esféricas, como puede ser el argón. O bien se ha de desarrollar otro modelo teórico que tenga en cuenta las características del nitrógeno.

Referencias

- [1] - J. Vrabec, J. Stoll, H. Hasse. "A Set of Molecular Models for Symmetric Quadrupolar Fluids". J. Phys. Chem B 2001, 105, 12126-12133.
[2] - W.A. Steele. "The interactions of gases with solid surfaces.". Oxford, Pergamon, 1974.