



Simposio sobre Adsorción Adsorbentes y sus Aplicaciones

San Luis, Argentina, 20-22 de Febrero de 2013

RESÚMENES

ORGANIZA: *Instituto de Física Aplicada
INFAP (CONICET-UNSL)
Ejército de los Andes 950
5700 San Luis*

AUSPICIAN:



Centro latinoamericano de Física
Centre Latino-Américain de Physique
Centro Latino Americano de Física



Ministerio de
Ciencia, Tecnología
e Innovación Productiva
Presidencia de la Nación



DEPARTAMENTO DE FÍSICA
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales
Universidad Nacional de San Luis

FCFN
Facultad de Ciencias Físico
Matemáticas y Naturales

FQBF
FACULTAD DE QUÍMICA BIOQUÍMICA Y FARMACIA
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS

ma microanalítica
argentina s.r.l.

Quantachrome
INSTRUMENTS
Optimizing particle performance

aerolineas.com



El Segundo Simposio sobre Adsorción Adsorbentes y sus Aplicaciones - 2° SAASA, tendrá lugar del 20 al 22 de Febrero de 2013 en la ciudad de San Luis, Argentina. El encuentro es organizado por el Instituto de Física Aplicada - INFAP, con la participación de científicos de varios países.

El primer SAASA tuvo lugar en San Luis en febrero de 2009 y sirvió para favorecer la interacción entre los grupos de trabajo y conformar una red de enriquecimiento mutuo y colaboración internacional. Esta interacción permitió gestar la idea de realizar el 1° Simposio Iberoamericano de Adsorción, IBA-1, que tuvo lugar en la ciudad de Recife, Brasil, en Mayo de 2012, en la que se decidió realizar el IBA-2 en Colombia en 2014.

Durante el 2° SAASA se dictarán conferencias plenarias y semiplenarias a cargo de distintos especialistas invitados y se expondrán trabajos en forma de poster para estimular la interacción entre los grupos afines.

Previo al inicio del 2° SAASA -del 17 al 19 de febrero-, se desarrollará la Escuela "Giorgio Zgrablich" que versará sobre el Estado del Arte en Adsorción: Avances en Teoría, Simulación y Experimentos. Algunos de los profesores invitados para la Escuela también dictarán conferencias plenarias en el SAASA.



Comité Científico

Aldo Migone, Southern Illinois University, USA

Antonio Gil Bravo, Universidad Pública de Navarra, España

Antonio José Ramirez Pastor, INFAP-UNSL-CONICET, Argentina

Carlos Wexler, University of Missouri, USA

Diana C. Silva de Azevedo, Universidade Federal do Ceará, Brasil

Carla Giacomelli, INFIQC-CONICET-Facultad de Cs. Qcas-UNC, Argentina

Enrique Rodriguez Castellón, Universidad de Málaga, España

Francisco Rodriguez Reinoso, Universidad de Alicante, España

Galo Soler Illia, Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina

Guillermo Calleja, Universidad Rey Juan Carlos, España

Joaquin Silvestre Alvero, Universidad de Alicante, España

José Luis Riccardo, Universidad Nacional de San Luis, Argentina

José Marchese, INFAP-UNSL-CONICET, Argentina

Juan Carlos Moreno, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia

Karim Sapag, INFAP-UNSL-CONICET, Argentina

Marcelo Javier Avena, Universidad Nacional del Sur, Argentina

Raúl López, INFAP-UNSL-CONICET, Argentina



Comité Organizador

PRESIDENTE DEL COMITÉ:

Karim Sapag

ORGANIZADORES:

Alexandre de Oliveira

Andrea Vallone

Andrés García

Antonio José Ramírez Pastor

Débora Soares Maia

Deicy Barrera

Ma. Eugenia Roca Jalil

Gabriela Amaya

Jhonny Villarroel

Marcelo Nazzarro

Raúl López

Sebastián Amaya

COLABORADORES ADMINISTRATIVOS:

Adriana Gallard

Monika González

ASISTENCIA TÉCNICA Y PÁGINA WEB:

Beatriz Perez

Dario Díaz

PLENARIAS

CARBONES NANOPOROSOS PARA ALMACENAMIENTO DE GAS NATURAL (PL-1)

Francisco Rodríguez-Reinoso

Laboratorio de Materiales Avanzados
Departamento de Química Inorgánica. Universidad de Alicante. España

www.ua.es/grupo/lma; reinoso@ua.es

RESUMEN

El carbón nanoporoso puede considerarse como el adsorbente ideal para el almacenamiento de gases (metano, hidrógeno, dióxido de carbono, etc.) por sus microporos (<2nm) en forma de rendija, que permiten una densidad de empaquetamiento de las moléculas de gas muy superior a la de poros cilíndricos de dimensiones similares. Sin embargo, el principal problema de estos adsorbentes es su baja densidad como consecuencia de su elevada porosidad interna; para poder alcanzar una adecuada densidad volumétrica de energía es necesario conformar el material. Como el conformado requiere normalmente el uso de un ligante, una importante parte de la porosidad puede quedar bloqueada al acceso del gas. Por esta razón es muy importante desarrollar métodos experimentales que permitan el conformado sin la necesidad de un ligante y esta es la solución aplicada en nuestro grupo de investigación.

Cuando un material lignocelulósico se utiliza como precursor de un carbón poroso (principalmente carbón activado) el conformado del material se puede realizar utilizando las propias breas producidas a lo largo de la impregnación de una activación química (con $ZnCl_2$ or H_3PO_4). Estos agentes químicos se utilizan para asegurar que la pirólisis del precursor se produce de forma controlada, dando un material (durante el ataque químico) con cierta flexibilidad y con un mayor rendimiento, en comparación con el carbón preparado sin impregnación. Si el precursor impregnado es conformado bajo presión en el momento y a la temperatura adecuados, es posible obtener piezas de la forma deseada y con relativamente alta densidad. Después del tratamiento térmico de estas piezas se obtiene una elevada porosidad, la mayor parte de la cual es de dimensiones inferiores a 2 nm. Otra aproximación seguida en nuestro grupo es utilizar como precursor una brea de mesofase (por ejemplo, obtenida a partir de un residuo de petróleo mediante pirólisis controlada bajo presión), que se caracteriza por su facilidad de autosinterización. Cuando este material se mezcla con KOH y se conforma bajo presión y se somete a un tratamiento térmico entre 600 y 800°C, el carbón resultante es esencialmente microporoso (< 2nm) y tiene un área superficial extraordinariamente elevada (puede alcanzar los 4000 m²/g). Esta pieza puede incluso activarse posteriormente mediante reacción controlada con CO₂, con lo que se puede aumentar la cantidad de gas adsorbido.

Los dos tipos de piezas de carbón nanoporoso se han utilizado para la adsorción/almacenamiento de metano a temperatura ambiente y hasta 3.5 MPa, la presión recomendada para uso en vehículos de motor. Algunos de nuestros carbones han sido capaces de almacenar hasta 160 V/V de metano cuando la densidad del sólido es alrededor de 0.6 g/cm³. Todavía necesitamos mejorar la densidad para poder alcanzar el objetivo recomendado por el DOE de Estados Unidos (180 V/V).

Finalmente, la adsorción de metano se ha llevado también a cabo sobre los mismos carbones húmedos con el objeto de estudiar la posible formación de los hidratos de metano dentro de



2° Simposio sobre Adsorción Adsorbentes y sus Aplicaciones

los poros estrechos del carbón. En este caso la adsorción se ha realizado a 3°C y hasta una presión de 10 MPa. Es de destacar que se produce un considerable aumento de la cantidad adsorbida cuando se sobrepasa la presión de 6 MPa, alcanzándose valores superiores a 250 V/V cuando la presión alcanza los 10 MPa.

Bibliografía

- Almansa C., Molina-Sabio M., Rodríguez-Reinoso F. *Adsorption of methane into ZnCl₂-activated carbon derived discs*. Microporous and Mesoporous Materials, (2004), 185-191.
- Molina-Sabio M., Rodríguez-Reinoso F. *Role of chemical activation in the development of carbon porosity*, Colloids & Surfaces, (2004), 15-25.
- Molina-Sabio M., Almansa C., Rodríguez-Reinoso F. *Phosphoric acid activated carbon discs for methane adsorption*, Carbon, (2003), 2113-2119.
- Ramos Fernández J.M., Martínez-Escandell M., Rodríguez-Reinoso F. *Production of binderless activated carbon monoliths by KOH activation of carbon mesophase materials*, Carbon, (2008), 384-386.
- Montiero de Castro M., Martínez-Escandell M., Molina-Sabio M., Rodríguez-Reinoso F. *Hydrogen adsorption on KOH activated carbons from mesophase pitch containing Si, B, Ti or Fe*, Carbon, (2010), 636-644.
- Wahby A., Ramos-Fernández J.M., Martínez-Escandell M., Sepúlveda-Escribano A., Silvestre-Albero J., Rodríguez-Reinoso F. *High surface area carbon molecular sieves for selective CO₂ adsorption*, ChemSusChem, (2010), 974-981.
- Hashimoto S., Fujimori T., Tanaka H., Urita K., Ohba T., Kanoh H., Itoh T., Asai M., Sakamoto H., Niimura S., Endo M., Rodríguez-Reinoso F., Kaneko K. *Anomaly of CH₄ molecular assembly confined in single-wall carbon nanohorn spaces*, Journal of the American Chemical Society, (2011) 2022-2024.
- Kubo T., Sakamoto H., Fujimori T., Itoh T., Ohba T., Kanoh H., Martínez-Escandell M., Ramos-Fernández J.M., Casco M., Rodríguez-Reinoso F., Urita K., Moriguchi I., Endo M., Kaneko K. *Diffusion-barrier-free porous carbon monoliths as new form of activated carbon*, Chemistry & Sustainability, (2012), 2271-2277.

Agradecimientos. Trabajo desarrollado dentro del proyecto hispano-japonés PLE2009-052.



ABOUT THE MEANING, USEFULNESS AND LIMITS OF THE “SURFACE AREA” OF AN ADSORBENT (PL-2)

Jean Rouquerol, Françoise Rouquerol, Philip Llewellyn and Renaud Denoyel

MADIREL, Aix-Marseille University / CNRS, France
jean.rouquerol@univ-amu.fr

ABSTRACT

The concept of specific surface area is probably the most used to-day to characterize an adsorbent, either experimentally or by simulation.

Unfortunately, the complexity of adsorbents, the variety of methods used for their characterization and the lack of coordination between scientists make that many definitions of a surface area are at present in use. They will be listed and commented.

Then, the general procedure to get the so-called “true” surface area will be examined.

This procedure will be applied to the most popular method for the determination of surface areas, namely the Brunauer, Emmett and Teller (BET) method. Because this method has always been, simultaneously, the object of much criticism and of much popularity, we propose to evaluate its limits and strengths, which we can see more clearly after 75 years of continuous use, even if the controversy about it is not yet completely extinguished. Comparison and checks with independent methods will be examined: Harkins and Jura “absolute calorimetric method”, neutron diffraction in the case of adsorption on graphitized carbon...

Some reservations will be brought about the “need of a true surface area determination”, especially in the presence of micropores.

To conclude, we shall stress the ambiguity of relatively common terms like “actual”, “effective”, “true” or even “accessible” surface area (used by simulators and experimentalists with a different meaning) and shall propose some ways of clarification.

We shall also stress that, although the original objective of the BET method is not always reached (namely a satisfactory determination of the probe-accessible surface area of an adsorbent), there is another objective, initially unexpected, which makes that the method remains a valuable means of characterization: it easily provides indeed, for most adsorbents, a highly reproducible and characteristic figure (the BET- n_m) corresponding to the major part of the adsorbate in energetical interaction with the surface.

EFFECT OF GEOMETRICAL CORRUGATION AND ENERGETICAL HETEROGENEITY OF GRAPHENE PORE WALLS ON GAS ADSORPTION IN NANOPOROUS CARBONS (PL-3)

Jacek Jagiello and James P. Olivier

Micromeritics Instrument Corporation, Norcross, GA 30093, USA.

jacek.jagiello@micromeritics.com

ABSTRACT

A recently published study [1] reported the atomic-resolution aberration corrected images of two activated carbons derived from different precursors. These images obtained by using scanning transmission electron microscopy (STEM) show clearly that the building blocks of these carbons are wrinkled and curved graphene sheets. The nonhexagonal defect rings of carbon atoms produce the curvature of the graphene sheets. These detailed observations obtained using atomic resolution microscope confirm earlier concepts of graphene based structure of microporous carbons.

This strong evidence of the existence of curved surfaces in activated carbons motivated us to study the effects of the surface curvature on gas adsorption in carbon pores with corrugated graphene walls. We use the two dimensional non-local density functional theory (2D NLDFT) to calculate adsorption isotherms and the fluid equilibrium density profiles. As an example, Figure 1 shows cross-sectional contours of the fluid density profiles calculated for N_2 at 77.3 K in carbon pores with smoothly corrugated graphene walls. It is important to note that the corrugation imposes adsorption energy heterogeneity of the surface. The adsorption energy is higher in concave areas of the surface than in flat or convex areas. As a result, adsorption begins at low pressures in concave parts of the surface and proceeds gradually through flat to convex areas. Important implications of surface energetical heterogeneity are adsorption isotherms that are smoother and have less pronounced monolayer transitions than those calculated for uniform surfaces.

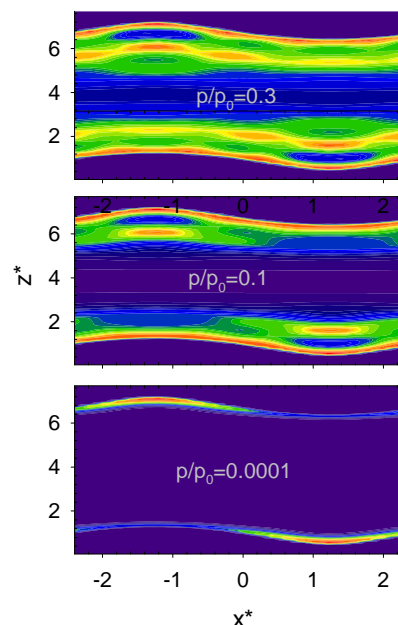


Fig. 1. Density profiles calculated for N_2 at 77.3 K in carbon pores with corrugated graphene walls.

References

- [1] Guo J., R. Morris J., Ihm Y., Contescu C. I., Gallego N. C., Dusher G., Pennycook S. J., Chisholm M. F., Small 2012, DOI:10.1002/smll.201200894.



MATERIALES MESOESTRUCTURADOS SBA-15 FUNCIONALIZADOS CON GRUPOS AMINO PARA LA CAPTURA DE CO₂ (PL-4)

Guillermo Calleja

Universidad Rey Juan Carlos – Spain

ABSTRACT

Los adsorbentes porosos de elevada selectividad para la captura de CO₂ están adquiriendo cada vez más importancia frente a las técnicas convencionales basadas en la absorción en fase líquida con disoluciones de aminas. Entre estos materiales adsorbentes destacan las sílices mesoestructuradas, como las de tipo M41S y SBA-15, por su elevada superficie específica y volumen de poros y por la uniformidad de tamaño de poros de sus estructuras.

Los soportes inorgánicos mesoestructurados pueden funcionalizarse con moléculas orgánicas que contengan grupos amino, los cuales actúan como centros de adsorción específicos para la captura del CO₂. La incorporación de grupos funcionales puede hacerse bien por adsorción química mediante técnicas de anclaje basadas en la reacción química entre moléculas de organosilanos que contienen grupos amino con los grupos silanol de la superficie del adsorbente, o por métodos físicos basados en la impregnación del material con moléculas orgánicas o polímeros que contienen un gran número de grupos amino, como la polietilenimina (PEI).

En este trabajo se han obtenido materiales mesoestructurados SBA-15 funcionalizados con grupos amino siguiendo procedimientos de anclaje y de impregnación, con moléculas orgánicas precursoras que contienen los grupos aminopropilo, AP(N); etilendiaminopropilo, ED(NN); dietilén-triaminopropilo, DT(NNN) y polietilenimina, PEI. Las isotermas de adsorción de CO₂ a 45 °C muestran que la capacidad de adsorción (mg CO₂/g ads) y la eficiencia de adsorción de los grupos amino (mol CO₂/mol N) dependen de la técnica de funcionalización y de la cantidad de compuesto orgánico utilizado. Las diferencias en la localización de los grupos amino en los materiales adsorbentes puede explicar su diferente comportamiento en la adsorción, siendo los materiales preparados por anclaje los que presentan una mayor distribución de los grupos amino, lo que favorece la difusión del CO₂ en el interior de la estructura y por tanto su captura.

Se ha estudiado también un método de doble funcionalización, basado en la impregnación de materiales SBA-15 de poro expandido previamente funcionalizados por anclaje, según las técnicas mencionadas. La combinación de grupos amino anclados en la superficie y grupos móviles en el interior del material pueden producir un efecto sinérgico, alcanzándose valores de captura de CO₂ de 235 mg CO₂/g (5.34 mmol CO₂/g) a 45 °C y 0.15 bar, así como elevadas eficiencias de adsorción de los grupos amino.



UNDERSTANDING REACTIVE ADSORPTION ON CARBONACEOUS ADSORBENTS: IMPORTANCE OF SURFACE FEATURES IN NANOREACTORS (PL-5)

Teresa J. Badosz

The City College of New York

ABSTRACT

Removal of small molecule toxic gases at ambient conditions is not a trivial task. Nevertheless, such separation processes are a necessity since those species are classified as TiCs (toxic industrial compounds) possessing threat to the general population. The problems with their removal are associated with small sizes and weak adsorption forces. Therefore other mechanisms have to be explored. One of them is reactive adsorption. To proceed with this approach modifications of the adsorbent surfaces towards imposing chemical reactions with the adsorbate are required. The targeted surface processes may involve complexation, acid-base reactions, hydrolysis, redox, etc. The goal is in decreasing/eliminating the toxicity and/or in increasing the adsorption forces with engagement of chemical bonds.

In my talk I am going to present our systematic approach to the design of effective adsorbents for such species as H_2S , SO_2 , NO_x , NH_3 . It involves understanding the physics and chemistry of the molecules to be adsorbed and evaluation of the surfaces of the adsorbents before and after the removal process. The stress will be placed on the role of porosity, surface chemistry, conductivity, and photoactivity. Such materials as nanoporous carbons, graphite oxides, composites of graphite oxides with zinc (hydr) oxide and MOF and sludge derived adsorbents will be addressed.



ADSORCIÓN A PARTIR DE SOLUCIONES ELECTROLÍTICAS (PL-6)

María dos Santos Afonso

INQUIMAE y DQIAQF-FCEN-UBA

RESUMEN

La adsorción a partir de soluciones juega un papel muy importante en un sinnúmero enorme de aplicaciones tecnológicas y plantea muchos y nuevos desafíos científicos ya que existen una gran variedad de mezclas líquidas con propiedades extremadamente diferentes. La comprensión completa de las reacciones de adsorción requiere que la interacción del soluto con la superficie sea caracterizada en términos de las propiedades físicas y químicas del soluto, el sorbente y el solvente. En el caso particular en que la fase líquida es una solución electrolítica, donde el solvente más común es el agua, la disolución de los electrolitos lleva a la formación de especies cargadas en solución y a la formación de una interfase sólido-agua que involucran fenómenos de hidratación y una distribución de especies cargadas sobre la superficie que desarrollan una carga eléctrica superficial.

Se analizan los procesos de adsorción en base a los enfoques electrostáticos y de complejación superficial y se discuten algunos casos de adsorción de metales pesados, arsénico y pesticidas sobre óxidos, arcillas y biomasa.



MÉTODOS AVANZADOS DE CARACTERIZACIÓN DE SUPERFICIES BIOMIMÉTICAS (PL-7)

Virginia Paredes^{1,2}, Emiliano Salvagni^{1,2}, Enrique Rodríguez-Castellón^{3*}, José María Manero¹

⁽¹⁾ Nanoengineering Research Centre (CRnE). Technical University of Catalonia (UPC), Barcelona, España

⁽²⁾ Biomaterials, Biomechanics and Tissue Engineering Group, Department of Materials Science and Metallurgy, Technical University of Catalonia (UPC), Barcelona, España,

⁽³⁾ Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Málaga, España

*castellon@uma.es

RESUMEN

La caracterización de superficies biomiméticas funcionalizadas con diferentes biomoléculas que se usan en la regeneración ósea (oseointegración) es un desafío para los especialistas en superficies, ya que las superficies de los materiales son muy complejas y la información que se obtiene es de gran importancia para evitar en lo posible los problemas de rechazo que ocurren al implantar materiales metálicos dentro del cuerpo humano.

Para la caracterización de las superficies metálicas biofuncionalizadas, El estudio se divide en tres etapas: limpieza y activación, silanización e inmovilización de biomoléculas sobre una aleación comercial CoCr aprobada por la ASTM. Siendo un aspecto clave el seguimiento del proceso de limpieza y activación de la superficie de la aleación, donde se compararán dos métodos; aplicación de plasma y tratamiento con ácido nítrico. Posteriormente, se procede a la silanización para injertar la biomolécula. Seleccionando el agente de silanización que presente mejor enlace covalente con la superficie metálica y mayor estabilidad térmica, química y mecánica.

Durante el desarrollo de la biofuncionalización se hará énfasis en la optimización de los procedimientos y la caracterización superficial de cada etapa por medio de diversas técnicas, entre ellas: XPS, ángulo de contacto, ToF SIMS, Interferometría, espectrometría UV, y técnicas de fluorescencia. Destacando aquellas que tienen una gran sensibilidad superficial. En cuanto a la limpieza y activación superficial, tanto los tratamientos químicos como el plasma de oxígeno limpian eficazmente las superficies, las hacen hidrofílicas y aumentan su energía superficial. Sin embargo la optimización de los procesos permite afirmar que en términos de densidad de grupos OH- en superficie, y en función de la relación OH-/O²⁻, el tratamiento más efectivo es el ácido nítrico. Al evaluar el proceso de silanización mediante el ToF SIMS y XPS, se pudo identificar la presencia de los organosilanos en superficie y sus respectivos enlaces covalentes y se seleccionó el más adecuado. Estudiándose finalmente la inmovilización de biomoléculas en superficies mediante XPS.



COADSORPTION AND SEPARATION OF GASES AT HIGH PRESSURE (PL-8)

Philip Llewellyn, Andrew Wiersum, Sandrine Bourrelly, Jean Rouquerol

MADIREL (UMR 7246), Aix-Marseille Univ. / CNRS, Centre de St. Jérôme, 13013 Marseille (France)

ABSTRACT

The separation step forms an essential part of many chemical processes. The separation of gases is particularly of interest with problems such as the purification of hydrogen and the recovery of carbon dioxide are of particularly topical. Several processes are used including cryogenic distillation, chemical absorption using solids or liquids and membranes. Physical adsorption can be of interest as it is quite simple to perform and can be economically viable if an adequate porous solid is used. Pressure or temperature swing adsorption are thus processes which are well established. However, the search for new adsorbent materials with working uptake capacity and selectivity is continuous.

Several types of adsorbents can be considered including zeolites, activated carbons and aluminas. However many novel materials are being considered for such applications including those from the Metal-Organic Framework family of materials.

A physical-chemical approach can be taken in a first instance to evaluate materials for gas separation. Predictive models can be applied to single gas isotherms and these predictions can be compared with coadsorption experiments. The comparison between such static measurements and column experiments is the final step prior to carrying out pilot scale testing.

This talk will describe the experiments that can be used for the evaluation of novel porous materials in for gas separation. Some basic thermodynamic modelling will be applied to single gas data, discussed and compared with mixture gas experiments.

In some cases, further characterisation is required in order to understand mixture adsorption and an example will be given of the evaluation of a flexible MOF for CO₂ recovery from CH₄.

SEMIPLENARIAS



STATUS REPORT OF THE IUPAC TASKGROUP ON: *PHYSISORPTION OF GASES, WITH SPECIAL REFERENCE TO THE EVALUATION OF SURFACE AREA AND PORE SIZE DISTRIBUTION (SP-1)*

Matthias Thommes (Chairman)*, Katsumi Kaneko, Alexander V. Neimark, James Olivier, Francisco Rodriguez-Reinoso, Jean Rouquerol, and Kennet S.W. Sing

Quantachrome Instruments, Boyton Beach, FL, USA

matthias.thommes@quantachrome.com

RESUMEN

Gas physisorption measurements are essential for the development of areas such as gas separation and production, gas analysis (e.g. the concentration of trace amounts and gas chromatography), gas storage (e.g. of hydrogen, methane), purification of gas exhausts (e.g. elimination of sulphides, carbon dioxide). In addition, characterization by gas physisorption is required before adsorbents are used in liquid media (e.g. for the delayed release of drugs or fertilizers, or for high performance liquid chromatography or the analysis and separation of bio-liquids). Hence the publication, in 1985, of an IUPAC report entitled REPORTING PHYSISORPTION DATA FOR GAS/SOLID SYSTEMS with special reference to the determination of surface area and porosity. The recommendations in the 1985 report have been broadly followed and referred to by the scientific and industrial community.

Over the past 24 years major advances have been made in the development of nanoporous materials with uniform, tailor-made pore structures (e.g. mesoporous molecular sieves, carbon nanotubes and nanohorns, microporous-mesoporous carbons and silicas with hierarchical pore structures). Their characterization has required the development of high resolution experimental protocols for adsorption of nitrogen (at 77 K), argon (at 87 K) carbon dioxide (at 273 K), and also organic vapours and supercritical gases. Furthermore, novel methods based on density functional theory and molecular simulation (e.g. Monte-Carlo simulations) have been developed to allow a more accurate and comprehensive pore structural analysis to be obtained from the high resolution physisorption data.

It is evident that these new procedures, terms and concepts now necessitate the updating and extension of the 1985 recommendations. As a consequence an international, well-balanced, IUPAC task group on PHYSISORPTION OF GASES, WITH SPECIAL REFERENCE TO THE EVALUATION OF SURFACE AREA AND PORE SIZE DISTRIBUTION had been approved by IUPAC in March 2010 (IUPAC Project No. 2010-009-1-100; <http://www.iupac.org/web/ins/2010-009-1-100>). The objectives of the new project are: (i) to provide authoritative, up-to-date guidance on gas physisorption methodology, and (ii) to draw attention to the advantages and limitations of using physisorption techniques for studying solid surfaces and pore structures with particular reference to the determination of surface area and pore size distribution. Hence, the work of this IUPAC task groups will allow one to recommend the changes required to clarify and standardize the presentation, nomenclature and methodology associated with the use of gas physisorption in different areas of pure and applied research. (iii) to finally publish this work as an IUPAC Technical Report, which should be considered as the update of the 1985 report?

In this contribution we will present essentially the final status of our work; the publication of the IUPAC- Technical Report is planned for the first half of 2013.



MEDICIONES DE ADSORCIÓN DE SOLVENTES EN FILMS DELGADOS MESOPOROSOS POR MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS Y DE REFLECTIVIDAD (SP-2)

Galo J. A. Soler-Illia

GQ-CAC-CNEA, Buenos Aires, Argentina

gsoler@cnea.gov.ar

RESUMEN

Los films delgados mesoporosos (FDMP) han suscitado un gran interés en la última década, por sus posibles aplicaciones en optoelectrónica, generación de energía solar, celdas de combustible, sensores o soportes de células. Estos materiales pueden obtenerse combinando técnicas de síntesis sol-gel con el autoensamblado de moldes orgánicos, en lo que se denomina Autoensamblado Inducido por Evaporación (AEIE). Las propiedades físicoquímicas de los FDMP pueden ser ajustadas "a medida" a partir de variables de diseño de síntesis, tales como el tipo de precursor inorgánico, tipo de molde de poros, etc, o bien a lo largo del procesado del material (condiciones de depósito, proceso post-síntesis, temperaturas de tratamiento, etc). Resulta fundamental conocer con precisión el tamaño y la morfología del poro. Este tipo de problemas está resuelto en el caso de polvos mesoporosos, ya que puede recurrirse a la adsorción de gases. En el caso de los films, hay dos limitaciones: una, es la cantidad de muestra (unos pocos mg por film) y la otra es la anisotropía del poro, debida a los procesos de contracción uniaxial del film que tienen lugar durante el secado y tratamiento térmico posterior.

En este contexto, se han desarrollado técnicas que permiten analizar el volumen poroso, y las dimensiones del poro basadas en la interacción de la radiación con los FDMP, como Surface Acoustic Wave (SAW), elipsoporosimetría (EP), o reflectometría de Rayos X (RRX). Este tipo de técnicas mide una variable relacionada a la densidad (XRR), al índice de refracción (EP) o propiedades mecánicas (SAW). Si bien estas técnicas son modelo-dependientes, su utilización cruzada permite una excelente determinación del volumen poroso, de la adsorción de vapores (agua, etanol, etc) y la estimación de tamaños de poro y de cuello interporo. Además, se trata de técnicas no destructivas, y con posibilidad de utilizarse en otros contextos (catálisis, sensado, etc). En este trabajo se presentará un estudio de PDMP de óxidos mono- y multicapa basado en elipsoporosimetría y reflectometría. discutiremos las posibilidades y las limitaciones de las técnicas, y su aplicación para el diseño de sensores de vapores y biocatalizadores.



LA REACTIVIDAD DE LA SUPERFICIE DE MINERALES EN MEDIOS ACUOSOS (SP-3)

Marcelo J. Avena

INQUISUR. Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca,
ARGENTINA

mavena@uns.edu.ar

RESUMEN

La corteza terrestre puede ser imaginada como un enorme lecho reactivo que contiene miles de millones de kilómetros cuadrados de superficie de minerales. Buena parte de esta superficie está en contacto con el agua y las sustancias que están disueltas en ella, y en esa zona de contacto (la interfaz sólido-solución acuosa o interfaz mineral-solución acuosa) ocurren muchos procesos físicos y químicos de relevancia ambiental.

En esta presentación se indican aspectos básicos de los procesos de adsorción en sólidos desde soluciones acuosas, haciendo hincapié en la reactividad de la superficie de óxidos metálicos. La presencia de agua, con su alta constante dieléctrica, permite la existencia de iones disueltos en el medio, la adsorción de iones y el desarrollo de cargas eléctricas superficiales. Por otra parte, como la superficie del sólido está siempre en contacto con moléculas de agua y iones, gran parte de las reacciones de adsorción deben considerarse como procesos de intercambio en la superficie, lo que marca una importante diferencia con los procesos de adsorción en la interfaz sólido-gas.

Se remarca también la importancia de conocer los diferentes planos superficiales expuestos por el sólido a la solución acuosa con el objeto de conocer y predecir la reactividad de los diversos grupos superficiales. Cada uno de estos grupos puede ser considerado como un complejo (generalmente octaédrico o tetraédrico) de un metal de transición superficial, donde parte de su esfera de coordinación corresponde a la fase sólida y la otra parte corresponde a la fase acuosa, lo que le permite participar de reacciones típicas de los complejos metálicos como lo son las reacciones de protonación, deprotonación, intercambio o sustitución de ligandos y transferencia de electrones. Se darán ejemplos de estudios de adsorción de iones, los cuales combinan mediciones macroscópicas de adsorción (isotermas) con mediciones espectroscópicas y cálculos teóricos.

Palabras clave: Minerales, Adsorción, Complejos superficiales



RESIDUOS DE LA INDUSTRIA DEL CUERO COMO ADSORBENTES DE CONTAMINANTES EN AGUA (SP-4)

Luiz Carlos Alves de Oliveira

DQ, UFMG, BH, Brasil

luizoliveira@qui.ufmg.br

RESUMEN

La industria del cuero produce un residuo altamente contaminante debido a la presencia de cromo. Este material debe ser desechado en vertederos especiales para no dañar el medio ambiente. En este trabajo, se propone la utilización de estos residuos en dos casos: (i) uso directo como adsorbente de contaminantes orgánicos e inorgánicos (arsénico y cromo) en agua; (ii) y después de promover una pirólisis controlada, uso de carbón activado resultante como adsorbente. Los resultados mostraron que el material puede ser utilizado como un adsorbente sin ningún tratamiento previo y tiene una alta capacidad de remoción de estos contaminantes. Después de la pirólisis, se obtuvo un carbón altamente poroso y ordenado en forma de fibras, con una superficie específica alta (800 m²/g) y una elevada capacidad de remoción de compuestos orgánicos en medio acuoso. Es importante destacar que el cromo permanece ligado químicamente a la estructura de los materiales, asegurando que el cromo no se lixivie durante su aplicación.



STUDYING SMALL MOLECULES ADSORPTION ON MOF FRAMEWORKS (SP-5)

A.J. Ramirez-Cuesta

ISIS Facility, Rutherford Appleton Laboratory, STFC, Chilton, OX11 0QX, UK

timmy.ramirez-cuesta@stfc.ac.uk

ABSTRACT

The interaction of small molecules with surfaces and porous materials can be studied with Inelastic Neutron Scattering Spectroscopy (INS)[1]. In the case of non hydrogenous compounds, like CO₂ and SO₂, the scattering cross section of the guest molecules is not enough to get a measurable signal. However it is possible to measure the change in the INS of a hydrogenated host as is the case of the NOTT 300 MOF. Inelastic neutron scattering spectroscopy (INS) is an ideal technique to study hydrogen containing materials [1,2]. Another great advantage of INS is that allows a more direct comparison between experimental results and theoretical calculations than is the case for optical spectroscopies (Raman and Infrared). In this study, we have successfully used combined INS and DFT to identify the dynamics of the captured CO₂/SO₂ molecules within NOTT-300 by investigating the change in the dynamics of the hydrogen atoms of the local MOF structure, including those of the hydroxyl groups and benzene rings of the ligand. Comparison of the INS spectra of bare and CO₂-loaded NOTT-300 reveals two major increases in peak intensity: at low energy transfer (30 meV) and at high energy transfer (125 meV).

Other effects are also apparent, indicating a stiffening effect of the motion of host system upon CO₂ adsorption. To understand these changes, DFT modeling has been used to simulate the INS spectra and optimize the structures for both NOTT-300 and NOTT-300 CO₂ loaded materials. A total of five hydrogen atoms H(0+) are cooperatively interacting with the O(0-) charge centers of CO₂ molecules in the channel via moderate to weak hydrogen bonds[3,4,5].

References

- [1] PCH Mitchell, SF Parker, AJ Ramirez-Cuesta and J Tomkinson "Vibrational Spectroscopy With Neutrons" World Scientific, London, (2005)
- [2] AJ Ramirez-Cuesta, MO Jones, WIF David, Materials Today, 12, 2009, 54-61.
- [3] Y. Liu, J.-H. Her, A. Dailly, A.J. Ramirez-Cuesta, D. A. Neumann and C. M. Brown, J. Am. Chem. Soc. 2008, 130, 11813.
- [4] Yang, S., Sun, J., Ramirez-Cuesta, A. J., Callear, S. K., David, W. I. F., Anderson, D. P., Newby, R., et al. (2012) Nature chemistry, 4(11), 887-94. doi:10.1038/nchem.1457
- [5] Yang, S., Callear, S. K., Ramirez-Cuesta, A. J., David, W. I. F., Sun, J., Blake, A. J., Champness, N. R., et al. (2011). Faraday Discussions, 151, 19. doi:10.1039/c1fd00006c



NUEVOS MATERIALES DE CARBÓN PARA CAPTURA DE CO₂ (SP-6)

J. Silvestre-Albero, M. Martínez-Escandell, F. Rodríguez-Reinoso

Laboratorio de Materiales Avanzados, Departamento de Química Inorgánica-Instituto Universitario de Materiales, Universidad de Alicante, España

joaquin.silvestre@ua.es

RESUMEN

La captura selectiva de CO₂ en gases de chimenea procedentes de la combustión de recursos fósiles constituye un reto tecnológico y medioambiental debido al impacto que estas emisiones tienen sobre la calidad de la atmósfera, siendo las principales responsables del efecto invernadero y el cambio climático. De entre las diferentes tecnologías estudiadas, la captura selectiva de CO₂ utilizando materiales porosos constituye una excelente alternativa frente a los procesos industriales actuales basados en procesos de absorción utilizando aminas en fase líquida. Dentro de los materiales porosos, los materiales de carbón se presentan como candidatos óptimos por varias razones: i) posibilidad de diseñar la estructura porosa para conseguir una capacidad de almacenamiento óptima, ii) posibilidad de modificar la química superficial para incrementar la interacción con una molécula ácida como es el CO₂, iii) posibilidad de diseñar el tamaño de entrada de los canales, de tal forma que el resto de especies presentes en el gas de chimenea queden excluidas de la estructura porosa y iv) su elevada hidrofobicidad, factor que disminuye los problemas en condiciones reales donde existe humedad. En este sentido, un adecuado control de las condiciones de síntesis del material de carbón (naturaleza del precursor, grado de activación, etc.) permite obtener tamices moleculares de carbón capaces de superar a cualquier otro material adsorbente (ej. zeolitas o MOFs) tanto en términos de capacidad de adsorción como en términos de selectividad hacia la adsorción selectiva de CO₂.



ZEOLITAS MODIFICADAS USADAS COMO TRAMPAS DE HIDROCARBUROS (SP-7)

Ramiro Serra, Soledad Aspromonte, Eduardo Miró, Alicia Boix

INCAPE (FIQ, UNL, CONICET) Santiago del Estero 2829, 3000, Santa Fe, Argentina.

aboix@fiq.unl.edu.ar

RESUMEN

La emisión de óxidos de nitrógeno (NOx), hidrocarburos sin quemar (HCs), compuestos orgánicos volátiles (VOCs), óxidos de carbono (COx), etc. provienen principalmente de efluentes de combustión. En motores que emplean gasolina se emplean catalizadores de tres vías (TWC) para minimizar la emisión de CO y NOx. Sin embargo, presentan poca actividad a bajas temperaturas y baja eficiencia cuando se opera en condiciones de mezcla pobre. El 80 % de los HCs se emiten en los primeros minutos después del arranque del motor, por lo que, el control de la emisión de hidrocarburos es un problema ambiental aún no resuelto. Una solución alternativa consiste en entrapar los hidrocarburos durante la etapa inicial de baja temperatura para luego eliminarlos cuando el motor alcanza las óptimas condiciones de funcionamiento, acoplando el proceso de adsorción con la reducción catalítica de los NOx.

En este trabajo se presentan estudios de adsorción isotérmica y desorción a temperatura programada, de tolueno o butano, como hidrocarburos aromáticos o lineales, respectivamente; representativos de los contaminantes presentes en los efluentes de combustión, empleando como material adsorbente zeolita MOR modificada con diferentes metales: Na⁺ y Cs⁺ (alcalinos); Co²⁺ (de transición) y Ag⁺ (noble) y en forma ácida (H⁺). Todos los adsorbentes mostraron que las formas sódicas poseen una mayor capacidad de adsorción y retención de HCs comparadas con las protónicas [1] y que en la mayoría de los casos existe un valor óptimo de carga de metal que promueve la retención [2]. Se observó que el tolueno interacciona con el catión a través de los electrones π y mediante los grupos metilo con los oxígenos de la red próximos al catión. El butano sólo lo hace mediante los grupos C-H, consecuentemente se desorbe a menor temperatura. Además la combinación de metales alcalinos con metales reactivos, como Ag y Co permitió acoplar los procesos de adsorción de HCs con la reacción de eliminación de NOx.

Palabras clave: trampa de hidrocarburos, capacidad de adsorción, metal-zeolita

Referencias

- [1] R. Serra, E. E. Miró, P. G. Bolcatto, A. V. Boix, *Microp. Mesop. Mat.* 147 (2012) 17-29
- [2] S. G. Aspromonte, E. E. Miró, A. V. Boix, *Adsorption* 18-1 (2012) 1-12.



DESARROLLO DE ADSORBENTES EN BASE A CARBONO Y BIOSORBENTES, APLICACIONES PARA REMOCIÓN DE CONTAMINANTES HÍDRICOS Y ATMOSFÉRICOS (SP-8)

Pablo Bonelli

Programa de Investigación y Desarrollo de Fuentes Alternativas de Materias Primas y Energía-
PINMATE, Depto Industrias - Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos
Aires, Intendente Güiraldes 2620, Ciudad Universitaria, (C1428BGA)

RESUMEN

Se reseñan algunos resultados alcanzados sobre el desarrollo de carbones activados a partir de biomásas lignocelulósicas y residuos agroindustriales mediante el proceso de activación química con ácido fosfórico y carbonato de potasio; se analiza su efectividad en la remoción de contaminantes del agua, principalmente, iones nitrato y colorantes orgánicos. También, mediante el proceso de activación química, se obtuvieron telas de carbón activado, a partir de precursores celulósicos empleando diferentes agentes activantes, resultando algunas de ellas adecuadas para la adsorción de compuestos orgánicos volátiles en fase gaseosa y nitratos en fase líquida. Otros resultados conciernen al potencial empleo de biomásas lignocelulósicas y residuos agroindustriales como biosorbentes de colorantes orgánicos presentes en aguas como mono y multisolutos. Se determinaron isotermas de equilibrio y curvas de ruptura, analizándose, además, la influencia de pretratamientos sencillos que mejoran notablemente la performance de los biosorbentes obtenidos.

Palabras clave: carbones activados convencionales, biosorbentes, telas de carbón activado, remediación medioambiental



SÍNTESIS DE NANOARCILLAS Y SU APLICACIÓN EN LIBERACIÓN CONTROLADA DE FÁRMACOS (SP-9)

*S. Mendieta, C. Pérez, M. Crivello**

Centro de Investigación y Tecnología Química – CITEQ, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Córdoba. Córdoba. 5016. Argentina.

*mcrivello@scdt.frc.utn.edu.ar

RESUMEN

Las nanoarcillas de Mg-Al, dentro de las cuales se encuentran las hidrotalcitas, consisten en capas catiónicas tipo brucita cargadas positivamente, con aniones intercambiables en el espacio interlamilar. Debido a su biocompatibilidad dichos compuestos pueden ser utilizados, entre otras aplicaciones, como sólidos anfitriones de fármacos. Los antiinflamatorios no esteroideos (Indometacina) son algunos de los fármacos que son posibles incorporar entre sus capas. Los mismos fueron introducidos utilizando dos rutas: directa e indirecta. En el primer caso el fármaco se incorporó durante la coprecipitación de formación del sólido anfitrión; mientras que en el segundo se sintetiza el sólido anfitrión y luego, mediante intercambio aniónico, se realiza la incorporación. En la incorporación directa se estudiaron diferentes valores de pH para la síntesis del sólido anfitrión; mientras que en el intercambio se estudiaron distintos tiempos de contacto. La incorporación del fármaco se verificó analizando el espacio interlamilar, por difracción de rayos X. La presencia de la banda perteneciente al ión carboxilato, observada por espectrofotometría infrarroja con transformada de Fourier, indica que el fármaco se encuentra en su forma aniónica e incorporada, como α -indometacina. A través del análisis de DSC se pudo determinar que las nanoarcillas estabilizan térmicamente al fármaco que tiene incorporado dentro de sus láminas. La evaluación de la capacidad de las nanoarcillas como sistemas de liberación controlada se realizó por medio de ensayos de disolución "in Vitro"



ADSORBENTES POTENCIALES PARA PROCESOS CROMATOGRÁFICOS DE SEPARACIÓN/PURIFICACIÓN DE BIOMOLÉCULAS (SP-10)

Ivanildo J. Silva Jr. y Diana C. S. Azevedo

Grupo de Pesquisa em Separações por adsorção (GPSA), Departamento de Engenharia Química,
Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, bl. 709, 60.455-760, Fortaleza, CE. Brasil.

diana@gpsa.ufc.br

RESUMEN

El coste de producirse biomoléculas con alta pureza y rendimiento se debe principalmente a los procesos dichos downstream o de separación/purificación. Etapas de separación cromatográfica son normalmente necesarias y una de las claves para su buen desempeño consiste en el desarrollo de fases estacionarias o adsorbentes adecuados. En el presente trabajo, se reportan tres casos de estudio de adsorción de proteínas-modelo en tres clases de adsorbentes: sílices mesoporosas estructuradas, hidróxidos dobles lamelares y quitosana modificada con colorantes como ligantes de afinidad. Los dos primeros adsorbentes (sílices mesoporosas y hidróxidos lamelares) han sido estudiados para la adsorción de BSA (albúmina del suero bovino) y lisosima mientras la quitosana modificada fue probada para la recuperación de IgG (inmunoglobulina G) del suero de la sangre humana. Distintos procedimientos de síntesis empleados exploraron la química de la superficie y modificaciones texturales, tales como ensanchamiento de poros y cambio del ordenamiento mesoscópico. La adsorción de las biomoléculas de prueba fue estudiada mediante ensayos en batch y en lecho fijo, utilizando mezclas-modelo y medios complejos, como el suero de la sangre humana. Los resultados ponen en relieve la importancia de los efectos de exclusión de la red porosa, de la química de superficie del adsorbente y del pH y fuerza iónica del fluido adsorptivo. Capacidades de retención/adsorción prometedoras se encontraron para la adsorción de proteínas en sílices sometidas a procedimientos de expansión de poros y en hidróxidos dobles lamelares, del orden de magnitud de cien mg por g de adsorbente.



EMPLEO DE ARCILLAS PARA CONTROL DE LA CONTAMINACIÓN DE AGUAS (EFLUENTES AGROQUÍMICOS) (SP-11)

Rosa M. Torres Sánchez

CETMIC- Camino Centenario y 506- M.B. Gonnet- Argentina

RESUMEN

El control de la contaminación del agua se ha transformado en una prioridad ambiental, debido a que el uso de pesticidas en los medios agrícolas y no agrícolas ha provocado tanto la contaminación de aguas superficiales como subterráneas, por escorrentía y lixiviación del suelo. En particular, la Unión Europea ha limitado la concentración máxima a 0,5 mg L⁻¹ para todos los plaguicidas/pesticidas en agua potable (Directiva 2000/60/CE).

En general las arcillas, han sido utilizadas como adsorbentes para remover distintos compuestos contaminantes (colorantes, metales pesados, pesticidas, etc.). En este trabajo se tratara en particular el uso de montmorillonitas (MMT) y sepiolitas (SEP) y de sus productos de tratamiento mecánico y/o térmico para retener un fungicida (tiabendazol) y un herbicida (Diuron) ambos de amplio uso fruti-agrícola.

Las distintas características moleculares de los pesticidas influyeron marcadamente en la adsorción en las arcillas. Mientras el tiabendazol, mostro una alta adsorción sobre MMT, esta disminuyo en sus productos de tratamiento (térmico>mecánico). El Diuron mostró una mayor adsorción en SEP que en MMT, manteniéndose el mismo comportamiento para los productos de molienda, aumentando en sus productos con posterior tratamiento térmico.

La caracterización por distintas técnicas (DRX; cargas eléctricas superficiales, superficie específica, porosidad, morfología, XPS) de los adsorbentes, sus productos de tratamiento y los productos de las distintas adsorciones permitió evaluar los sitios de adsorción involucrados y la importancia de la porosidad en dicho mecanismo.



ADSORBENTES ANFIFÍLICOS MAGNÉTICOS (SP-12)

Rochel Montero Lago

DQ, UFMG, BH, Brasil

RESUMEN

Compuestos anfifílicos, híbridos y magnéticos, pueden ser preparados por el crecimiento catalítico de nanotubos de carbono (CNTs) y de nanofibras (CNFs), en diferentes matrices tales como vermiculita, crysotila y residuos de lodo rojo. Distintos análisis con SEM, TEM, Raman, difracción de rayos X, Mossbauer, TG / DTA mostraron que la deposición química de vapor (CVD) con CH₄ o etanol producen CNF con núcleos de Fe magnético, fijos en la superficie del soporte. Debido al carácter anfifílico, los compuestos pueden ser fácilmente dispersados en agua y adsorber eficientemente moléculas contaminantes con carácter hidrofóbicos. Por ejemplo, los compuestos mostraron notables capacidades de adsorción para la hormona de etinilestradiol, por ejemplo, 2-4 mg per m², en comparación con ca. 0,1 mg per m² obtenido para carbones activados de alta superficie específica y CNT de paredes múltiples. Estos resultados se discuten en términos de las elevadas superficie hidrófoba expuesta por los CNT y CNF fijos entre láminas de silicatos. Por la naturaleza magnética de los adsorbentes, los compositos pueden ser fácilmente removidos del agua por un proceso de separación magnético. Además, la combinación de los hidrófilos, oxidos de Si y Al superficial con los hidrófobos de la nanoestructura de carbono, producen materiales anfifilos con efecto notable en la interacción y la separación de dos fases del sistema, por ejemplo aceite y agua. Se demuestra que esta emulsión es muy importante para la síntesis de biodiesel y la hidrólisis del aceite de soja. Después de la reacción, la emulsión puede ser fácilmente interrumpida por un proceso de separación magnética simple. Este procedimiento de emulsión-demulsificación puede también ser utilizado para la purificación de biodiesel y tratamiento de aguas residuales. Los materiales compuestos también se utilizan para preparar un catalizador de Pd soportado, con propiedades magnéticas, para la hidrogenación de la molécula modelo 1,5-COD.



EVALUACIÓN DEL USO DE ARCILLAS PARA LA REMOCIÓN DE CROMO (III) PRESENTE EN EFLUENTES DE CURTIEMBRES (SP-13)

Cristina Volzone

CETMIC (Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica).
CC49, Cno. Centenario y 506, (1897) M.B.Gonnet, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

cvolzone@cetmic.unlp.edu.ar

RESUMEN

Desde hace varios años se han incrementado las investigaciones relacionadas a la remediación del medio ambiente en todos sus aspectos, de los cuales el saneamiento de las aguas contaminadas (provenientes en su mayoría de actividades industriales) es de gran interés. El cromo es uno de los elementos metálicos que debe ser removido, el cual en medio acuoso puede estar presente en diferentes estados de oxidación (ej. Cr^{3+} , Cr^{6+}) y agrupados de diferentes formas (monomérica ó polimérica) si nos referimos al Cr^{3+} en especial. Para la remoción del mencionado metal presente en medio líquido pueden aplicarse diferentes métodos y/o adsorbentes. En esta ponencia se presentarán resultados sobre uso de arcillas naturales y/o modificadas como sólidos adsorbentes de cromo (III) a partir de soluciones preparadas en el laboratorio y de efluentes de curtiembres. La capacidad de retención de un mismo sólido arcilloso difiere cuando el cromo se encuentra presente como monosoluto o en efluente, debido a la presencia de interferentes.



MERCURY INTRUSION EFFECTS MODELED IN AXIALLY SYMMETRIC PORES WITH ATTENUATED CROSS SECTION (*SP-14*)

I. Kornhauser⁽¹⁾, C. Felipe⁽²⁾, J.M. Esparza⁽¹⁾, A. Domínguez⁽¹⁾,
M. Ponce⁽¹⁾, F. Rojas^{(1)*}

⁽¹⁾ Área de Físicoquímica de Superficies, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana – Unidad Iztapalapa, MÉXICO, 09340 D.F.

⁽²⁾ Centro Interdisciplinario de Investigaciones y Estudios sobre Medio Ambiente y Desarrollo (CIIEMAD), Instituto Politécnico Nacional, MÉXICO 07340 D.F.

fernando@xanum.uam.mx

ABSTRACT

Hg intrusion inside axially symmetric pores with an attenuated cross-section ratifies some interesting effects. One is the influence of the pore wall angle of inclination on the intrusion pressure and meniscus radius of curvature. Another is that Hg penetration in pores of this sort cannot proceed gradually but instead in a jump-wise manner. Virtual penetration curves indicate Laplace stable or unstable states. In structures depicting a sinuous cavity to throat interconnections, a single meniscus can be transformed into two menisci by a snap-off mechanism. Hysteresis in these structures is the more intense as pore entities become sinuous. The onset of liquid penetration is not always occurring at the minimum cross section of a pore channel but at a specific point beyond this occlusion. The particular pore shapes in this work depict a series of alternating shallow bulges and throats; firstly, the ingoing liquid is subjected to enough pressure as to overcome the pore entrance; thereafter, the liquid phase penetrates spontaneously along the pore length at constant pressure. Due to the incessant diminution in pore radius along the pore length, there eventually surges the onset of a more intense second liquid penetration zone in which V_p the penetration volume, increases while the meniscus advances spontaneously from the vicinity of the first bulge to the neighborhood of the second neck. After, the pressure keeps mounting steadily with the respective increase of V_p . This last zone is Laplace stable, with consecutive menisci of smaller and smaller radius of curvature.

Keywords: Intrusion, Mercury, Cylindrical

References

- [1] Adamson, A. W. (1990) *Physical Chemistry of Surfaces*, Wiley, New York.
- [2] Washburn, E. W., *Phys. Rev.* 17, 273.

PÓSTERES

DISPERSIONES COLOIDALES DE GRAFENO (P-01)

M. Quintana⁽¹⁾ *

⁽¹⁾ Materiales Nanoestructurados Multifuncionales, Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, SLP, México

* mildred@ifisica.uaslp.mx

RESUMEN

El grafeno es una lámina de átomos de carbono fuertemente enlazados en una red hexagonal. Algunas de sus propiedades significativas incluyen transporte electrónico balístico, efecto cuántico de Hall a temperatura ambiente, alta resistencia al rompimiento, conductividad térmica elevada, transparencia y la habilidad de soportar muy altas densidades de corriente. Todas estas propiedades hacen del grafeno un material muy robusto a nivel atómico, ideal para ser usado como plataforma en el desarrollo de dispositivos electrónicos, sensores y celdas de combustible. Esto evidencia la necesidad de generar protocolos que permitan la producción de láminas de grafeno en grandes cantidades. En esta dirección, la producción de grafeno mediante la exfoliación del grafito en fase líquida permite su producción y manipulación. En este trabajo presentaré cómo generar dispersiones coloidales de grafeno por medio de la adsorción de diferentes moléculas en su superficie.^[1-4] Asimismo, también mencionaré cómo modificar las propiedades físicas o químicas del grafeno en la dispersión coloidal mediante funcionalización con grupos químicos específicos.^[4-6] Estas dos estrategias permiten la integración del grafeno en materiales compuestos para diversas aplicaciones.^[7]

Palabras clave: Dispersión Coloidal, Grafeno, Adsorción Molecular, Funcionalización Química.

Referencias

- [1]. Quintana, M.; Vázquez, E.; Prato, M. *Organic Functionalization of Graphene in Dispersions*, Acc. Chem. Res., (2012), ASAP DOI: 10.1021/ar300138e.
- [2]. Quintana, M.; Grzelczak, M.; Spyrou, K.; Baals, S.; Kooi, B.; Van Tendeloo, G.; Rudolf, P.; Prato, M. *Production of Larger Graphene Sheets by Exfoliation of Graphite under High-Power Ultrasonics in the Presence of Tiopronin*, Chem. Commun., (2012), 12159-12161.
- [3]. León, V.; Quintana, M.; Herrero, M. A.; Fierro, J. L. G.; de la Hoz, A.; Prato, M.; Vázquez, E. *Few layers graphenes from ball-milling of graphite with melanine*, Chem. Comm., (2011), 10936-10938.
- [4]. Quintana, M.; Grzelczak, M.; Spyrou, K.; Calvaresi, M.; Baals, S.; Kooi, B.; Van Tendeloo, G.; Rudolf, P.; Zerbeto, F.; Prato, M. *A Simple Road for the Transformation of Few-Layers Graphene into MWNTs*, J. Am. Chem. Soc., (2012), 13310-13315.
- [5]. Quintana, M.; Spyrou, K.; Grzelczak, M.; Browne, W. R.; Rudolf, P.; Prato, M. *Functionalization of Graphene via 1,3-Dipolar Cycloaddition*, ACS Nano, (2010), 3527-3533.
- [6]. Quintana, M.; Montellano, A.; del Rio, E. A.; Van Tendeloo, G.; Bittencourt, C.; Prato, M. *Selective Organic Functionalization of Bulk or Graphene Edges*, Chem. Commun., (2011), 9330-9332.
- [7]. M. Quintana, et al. *Energy Materials by Molecular Design: Knitting the Catalytic Pattern of Artificial Photosynthesis to a Hybrid Graphene Nano-texture*, Submitted to ACS Nano (2012).



PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE ADSORBENTES MESOPOROSOS MODIFICADOS CON COBALTO (P-02)

V. Elías^(1,3), N. Cuello⁽¹⁾, M. Crivello⁽¹⁾, M. Oliva^(2,3), G. Eimer^{(1,3)*}

⁽¹⁾ Centro de Investigación y Tecnología Química (CITeQ), Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Córdoba, ARGENTINA.

⁽²⁾ Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG-CONICET), FaMAF, UNC, ARGENTINA.

⁽³⁾ CONICET, ARGENTINA.

*geimer@scdt.frc.utn.edu.ar

RESUMEN

La importancia de adsorbentes inorgánicos con tamaños de poros controlables se debe a sus innumerables aplicaciones. Los tamices mesoporosos MCM-41 presentan distribución de poros uniforme, gran área superficial ($> 1000 \text{ m}^2/\text{g}$) y alta capacidad de adsorción. El empleo de agregados supramoleculares de micelas de surfactante permite obtener tamices de diámetros de poro variables entre 2-10 nm, lo que posibilita la adsorción selectiva de sustratos. Las modificaciones químicas de su superficie los hacen sensibles a la presencia de un campo magnético, generando aplicaciones tecnológicas para procesos de separación magnética, transporte de compuestos adsorbidos, desarrollo de sensores magneto-químicos y catálisis [1].

En este trabajo se sintetizaron silicatos MCM-41 modificados con Co por el método de impregnación húmeda [2]. Se utilizaron soluciones de nitrato de Co de diferentes concentraciones para obtener cargas teóricas de: 15,0-10,0-5,0-2,5 %p/p. Los adsorbentes se caracterizaron por DRX, Adsorción de N_2 , ICP y además se midió su respuesta magnética. Todos los sólidos presentaron buen ordenamiento estructural y elevadas áreas superficiales, parámetros que fueron afectados por el incremento en la carga de Co. Se observó que el tamaño de cristalito de la fase Co_3O_4 detectada ($\sim 7 \text{ nm}$) fue creciendo, apareciendo para cargas del metal de 5,0 %p/p. La respuesta magnética depende del contenido de metal observándose un cambio en el comportamiento desde paramagnético a súper-paramagnético cuando la carga pasó del 5,0 al 2,5 % p/p. Esto estaría asociado a la disminución del tamaño de cristalito y a la mayor dispersión de esta fase sobre la estructura de la matriz.

Palabras clave: Adsorbentes mesoporosos, Propiedades magnéticas.

Referencias

- [1] Elías, V; Oliva, M; Urreta, S; Silvetti, P; Sapag, K; Mudarra-Navarra, A; Casuscelli, S; Eimer, G. *Magnetic properties and catalytic performance of iron-containing mesoporous molecular sieves*, Applied Catalysis A, (2010), 92 – 100.
- [2] Elías, V; Vaschetto, E; Sapag, K; Oliva, M; Casuscelli, S; Eimer, G. *MCM-41-based materials for the photo-catalytic degradation of Acid orange 7*, Catalysis Today, (2011), 58 – 65.



ESTIMACIÓN DE LA PROPIEDAD HIGROSCÓPICA DE PORCELANAS ELECTROTÉCNICAS MEDIANTE “LASER SPECKLE DINÁMICO” (P-03)

G. Bertolini^(1a), C.I. Cabello^(1ab), R. Arizaga⁽²⁾, M. Trivi^{(2b)*}, G. Barbera⁽³⁾

⁽¹⁾ CINDECA, (CCT CONICET La Plata-UNLP) Calle 47 N° 257, ^aFac. de Ingeniería, UNLP y ^bCIC PBA, (1900) La Plata, Argentina.

⁽²⁾ Centro de Investigaciones Ópticas (CONICET La Plata CIC) y UID Optimo, Facultad de Ingeniería, UNLP, Casilla de Correo 3, (1897) Gonnet, La Plata, Argentina.

⁽³⁾ IITREE, (Instituto de Investigaciones Tecnológicas para Redes y Equipos Eléctricos). Facultad de Ingeniería, UNLP. Calle 48 y 116 (B1900AMF), La Plata, Argentina.

*marcelot@ciop.unlp.edu.ar

RESUMEN

La porcelana electrotécnica es el más importante de los materiales cerámicos de múltiples usos en distintas ramas de la Electrotecnia. Se compone de la mezcla de tres aluminosilicatos en una proporción típica: 50 % caolín, 25 % cuarzo y 25 % feldespato. Esta porcelana básica posee propiedades eléctricas, mecánicas y térmicas que naturalmente varían según la composición de dicha mezcla. Una de las características que determinan la calidad de estos materiales es la impermeabilidad al agua y a los gases que dependen de su porosidad [1].

En este trabajo se analiza la propiedad higroscópica de distintos tipos de porcelana de diferente composición y porosidad mediante la técnica Laser de “speckle dinámico” [2]. La misma se basa en el fenómeno de interferencia que se observa cuando un haz de luz laser ilumina una superficie ópticamente rugosa. Cuando la superficie no es rígida sino que evoluciona en el tiempo, los “speckles” también cambian, existiendo una correlación entre ambos que permite caracterizar el proceso dinámico en la superficie a partir del análisis del “speckle”. Este tipo de fenómeno es típico en muestras biológicas iluminadas por láser y se observa también en algunos procesos industriales. Los resultados experimentales muestran la evolución temporaria de los diagramas de “speckle” durante el proceso hidroabsorbente de cada material. Se determinó que es posible correlacionar este efecto con la porosidad de los mismos. Si bien los resultados aún son preliminares y deben profundizarse con nuevos análisis para varios tipos de porcelanas, es posible inferir que la técnica es potencialmente muy útil para esta clase de análisis con apreciables ventajas frente a las técnicas convencionales.

Palabras clave: porcelanas electrotécnicas, porosidad, higroscopicidad, láser “speckle”,

Referencias

- [1] Ramírez Vázquez, J. “Materiales Electrotécnicos. Enciclopedia CEAC de la Electricidad”.
- [2] Trivi, M. en “Dynamic Laser Speckle and Applications”. Chap. 2. H Rabal, R. Braga ed. CRC Press (Boca Ratón, FL, USA), 2009.



INFLUENCIA DEL MÉTODO DE SÍNTESIS EN LOS ÓXIDOS MIXTOS DE COMPUESTOS TIPO HIDROTALCITA (P-04)

N. Bálsamo^{(1)*}, M. Oliva⁽²⁾⁽³⁾, A. García Blanco⁽⁴⁾, E. Herrero⁽¹⁾, G. Eimer⁽¹⁾⁽³⁾, M. Crivello⁽¹⁾

⁽¹⁾ Centro de Investigación y Tecnología Química, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Córdoba, ARGENTINA

⁽²⁾ Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, ARGENTINA

⁽³⁾ CONICET, ARGENTINA

⁽⁴⁾ Laboratorio de Sólidos Porosos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA

*nancybalsamo@gmail.com

RESUMEN

Los óxidos mixtos de Mg-Al con un tercer metal incorporado, tales como cationes monovalentes (Li, K, Cs), divalentes (Ca, Ba) y trivalentes (Ce, La), derivados de hidróxidos mixtos con estructura tipo hidrotalcita se comportan como catalizadores básicos para diferentes reacciones orgánicas. En este trabajo se muestran los resultados de sintetizar óxidos metálicos mixtos por los métodos de coprecipitación o incorporación directa e impregnación por vía húmeda (óxido mixto de Mg-Al como soporte en contacto con la solución de la sal del metal a incorporar) [1]. Las relaciones molares de síntesis de los cationes mencionados fueron constantes para cada uno de los métodos. Los óxidos mixtos se caracterizaron por DRX, ICP y TPD con molécula sonda de CO₂. Dichas técnicas de análisis permitieron identificar la presencia de los óxidos de los metales, la proporción de incorporación del tercer metal y la densidad de sitios básicos totales de los materiales. Se observó una mayor incorporación del tercer metal y más elevada densidad de sitios básicos en aquellos óxidos sintetizados por el método de impregnación. Lo que estaría indicando una vía apropiada de síntesis de los óxidos metálicos mixtos para controlar las propiedades básicas, teniendo en cuenta que la naturaleza de los sitios básicos en catalizadores heterogéneos es aún poco conocida y esto es probablemente una de las razones para la aplicación relativamente escasa de catalizadores sólidos básicos en las reacciones orgánicas como la transesterificación [2].

Palabras clave: óxidos metálicos mixtos, compuestos tipo hidrotalcita, coprecipitación, impregnación.

Referencias

[1] Bálsamo N., Mendieta S., Oliva M., Eimer G., Crivello M. *Synthesis and characterization of metal mixed oxides from Layered Double Hydroxides* Procedia Materials Science, (2012), 506 – 513.

PREPARACIÓN DE CATALIZADORES PARA CELDAS DE COMBUSTIBLES MEDIANTE MÉTODO DE IMPREGNACIÓN (P-05)

M. Bruno^(1,3), F. Viva⁽¹⁾, N. Veizaga⁽²⁾, E. Franceschini⁽¹⁾, S. de Miguel⁽²⁾, H. Corti⁽¹⁾

⁽¹⁾ Grupo de Celdas de Combustible, Departamento de Física de la materia Condensada, CAC-CNEA; Av. Gral. Paz 1499 (B1650KNA) San Martín, Bs. As, Argentina.

⁽²⁾ Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE), Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, CONICET, Santiago del Estero 2654, 3000 Santa Fe, Argentina.

⁽³⁾ Escuela de Ciencia y Tecnología, Universidad de Gral. San Martín, Martín de Irigoyen 3100 (1650) Buenos Aires, Argentina.

*hrcorti@cnea.gov.ar

RESUMEN

El soporte carbonoso tiene una fuerte influencia en las características y propiedades del catalizador. En general se busca lograr la máxima dispersión del catalizador mediante la utilización un soporte con alta superficie específica. Sin embargo, en la preparación de catalizadores anódicos para celdas de combustible alimentadas con metanol, el soporte carbonoso también debe proveer un eficiente transporte de los reactantes de fase líquida (CH_3OH , H_2O) y el escape del producto de reacción en fase gaseosa (CO_2) de la zona catalítica. Por tal motivo, los carbones mesoporosos resultan atractivos para su uso como soportes de catalizador, teniendo gran potencial para mejorar tanto la dispersión y como la utilización de catalizadores de metales.

En este trabajo se analiza el efecto del soporte carbonoso sobre catalizadores de Pt y PtRu. Se utilizó carbón vulcan XR-72 (CABOT) y carbón mesoporoso obtenido mediante carbonización a partir de resina resorcinol formaldehído. La síntesis de nanopartículas se llevó a cabo mediante el método de impregnación. Para el análisis estructural de los materiales carbonosos se utilizó microscopía SEM, desorción a temperatura programada e isotermas de adsorción de N_2 . Los catalizadores fueron caracterizados mediante difracción de rayos X, microscopía TEM, espectroscopía de fluorescencia de rayos x y técnicas electroquímicas.

Los resultados indican que el soporte carbonoso nanoestructurado favorece la dispersión de catalizador, obteniéndose una mayor superficie electroquímicamente activa y menor tamaño de partículas. Además, se logra mayor grado de aleación de las nanopartículas bimetálicas sintetizadas y una mejor respuesta electroquímica a la oxidación de metanol.

Los buenos resultados obtenidos permitirían avanzar en la optimización del catalizador y reducción de costos de producción a larga escala de estos dispositivos de conversión de energía.

Palabras clave: celdas de combustible, catalizador, carbón estructurado



EVALUACIÓN MEDIANTE “LASER SPECKLE DINÁMICO” DE LA CAPACIDAD HIDROADSORBENTE DE SÍLICES MESOPOROSAS SBA-15 FUNCIONALIZADAS (P-06)

M.S. Legnoverde Rey^(1a,2), E.I. Basaldella^(1b,2), G. Bertolini⁽¹⁾, C.I. Cabello^(1b), R. Arizaga⁽³⁾, M. Trivi^(3b)

⁽¹⁾Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas (CINDECA) ^aCONICET-UNLP ^bCIC PBA

⁽²⁾Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencia y Tecnología de Materiales (CITEMA), Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional La Plata, Argentina

⁽³⁾Centro de Investigaciones Ópticas (CONICET La Plata CIC) y UID Optimo, UNLP, Facultad de Ingeniería, Argentina.

*marcelot@ciop.unlp.edu.ar

RESUMEN

Los diagramas de “Laser speckle dinámico” son característicos de muestras biológicas y se pueden observar también en procesos industriales no-biológicos que incluyen el proceso de secado de pinturas; la corrosión e intercambio de calor, etc. Recientemente en nuestros laboratorios se aplicó esta técnica a varios tipos de sílice, alúminas y aluminosilicatos naturales o modificados. La técnica mostró la posibilidad de correlacionar la actividad de Speckle obtenida durante el proceso de adsorción de agua en cada muestra con algunas de sus propiedades texturales y químicas [1, 2]. En el presente trabajo se extiende esta aplicación al análisis de hidroadsorción de sílices mesoporosas del tipo SBA-15. Estos materiales son ampliamente utilizados como catalizadores o adsorbentes [3].

Los sólidos se sintetizaron por hidrólisis y condensación de tetraetoxisilano, utilizando como agente direccionador de estructura el polímero tribloque Pluronic 123. La superficie de los poros fue funcionalizada con grupos amino y con grupos sulfónicos con el objetivo de conferirle diferentes propiedades texturales y basicidad a la superficie interna de los poros.

Los resultados experimentales muestran la evolución temporaria de los diagramas de “speckle” de cada material durante el proceso de adsorción de agua. Se determinó que es posible correlacionar el efecto “Speckle” de la hidroadsorción de cada especie con la acidez superficial de las mismas.

Palabras clave: Silices mesoporosas, laser, speckle.

Referencias

- [1] Trivi, M. en “*Dynamic Laser Speckle and Applications*”. Chap . 2. H Rabal, R. Braga ed. CRC Press (Boca Ratón, FL, USA), 2009.
- [2] Bertolini, G., Cabello, C., Arizaga, R. Trivi, M. XXIII CICAT, 2012 ACTAS.
- [3] Basaldella, E., Legnoverde, M. S. J. *Sol-Gel Sci. Technol.* 56 (2010) 191-196.



CARBÓN MESOPOROSO CMK-3 Y CARBONES ACTIVADOS A PARTIR DE CAROZOS DE DURAZNO COMO ALMACENADORES ELECTROQUÍMICOS DE ENERGÍA (P-07)

M. Dávila^{(1)*}, D.J. Cuscuenta^(2,3), D. Soares Maia⁽¹⁾, D. Barrera⁽¹⁾, M.S. Moreno⁽²⁾, K. Sapag⁽¹⁾, A.A. Ghilarducci^(2,3)

⁽¹⁾ Departamento de Física, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA.

⁽²⁾ Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica (CAB-CNEA) y Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), ARGENTINA.

⁽³⁾ Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo (IB-UNC), ARGENTINA.

*maradav@unsl.edu.ar

RESUMEN

Debido al agotamiento de los combustibles fósiles y al incremento de los problemas ambientales, uno de los mayores desafíos en la actualidad es hallar dispositivos que puedan utilizarse para almacenar energía limpia, y que a su vez, cumplan con los requerimientos de capacidad y potencia de las aplicaciones de interés [1]. Los supercapacitores son muy atractivos para este fin porque a diferencia de las baterías pueden operar a muy altas velocidades de carga y descarga. Los materiales carbonosos son los más utilizados para los electrodos debido a su bajo costo, a su gran versatilidad en la forma, alta área superficial, buena conductividad eléctrica y una estabilidad química excelente [2].

En el presente trabajo se sintetizó carbón mesoporoso nanoestructurado tipo CMK-3 y carbones activados. El carbón CMK-3 se realizó mediante la técnica de nanocasting utilizada por Yang et al. [3], utilizando como template sílica SBA-15 y sacarosa como precursor de carbón. Los carbones activados se obtuvieron a partir de carozos de duraznos con y sin activación química con distintas concentraciones de ácido fosfórico [4]. Todos los materiales se caracterizaron mediante isotermas de adsorción de N₂ a 77K. Para corroborar la estructura ordenada del carbón CMK-3 se lo caracterizó además con microscopía electrónica de barrido (SEM) y microscopía electrónica de transmisión (TEM). Para la caracterización electroquímica se prepararon celdas de tres electrodos, un electrodo de trabajo donde se colocó el material activo, un contra-electrodo de malla de Ni y un electrodo de referencia de Hg/HgO. Como electrolito se utilizó una solución de KOH 6M. Se realizaron medidas de carga y descarga y voltametría cíclica. Se analizó la ciclabilidad y la capacidad de cada material para su utilización en supercapacitores.

Palabras clave: CMK-3, carbón activado, carozos de durazno, supercapacitores

Referencias

- [1] Lang, J.; Yan, X.; Liu, W.; Wang, R.; Xue, Q. Influence of nitric acid modification of ordered mesoporous carbon materials on their capacitive performances in different aqueous electrolytes. *Journal of Power Sources*, (2012), 204, 220-229.
- [2] K. Xia, Q. Gao, J. Jiang, J. Hu, Hierarchical porous carbons with controlled micropores and mesopores for supercapacitor electrode materials, *CARBON*, (2008), 46, 1718-1726.
- [3] Yang, M. and Gao, Q., *Microporous and Mesoporous Materials*, (2011), 143, 230-235.
- [4] Prauchner, M.J. and F. Rodriguez-Reinoso. Preparation of granular activated carbons for adsorption of natural gas. *Microporous Mesoporous Mater*, (2008), 109, 581-584.



CARBONES ACTIVADOS CON DIFERENTES POROSIDADES: ESTUDIO POR ADSORCIÓN FÍSICA DE GASES Y ADSORCIÓN DE AGUA (P-08)

M. Huertemendía Marín ⁽¹⁾, D.M. Hervé ⁽¹⁾, A.A. García Blanco^{(2)*}, K. Sapag ⁽²⁾

⁽¹⁾ Medio Ambiente y Laboratorio de Aprovechamiento de Minerales. Centro de Investigaciones para la Industria Minero Metalúrgica, CIPIMM-MINEM, CUBA

⁽²⁾ Laboratorio de Sólidos Porosos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA

*aagarciabl@gmail.com

RESUMEN

Los carbones activados se incluyen entre los productos más versátiles en relación con los procesos de separación- purificación, así como en los procesos catalíticos. El uso de materiales lignocelulósicos (cascarón de coco, maderas, etc.), como materia prima para la obtención de carbones activos está ampliamente difundido en la práctica. Está bien establecido que las aplicaciones de los carbones activados están en dependencia directa de sus propiedades texturales: superficie específica, volumen de poros y la distribución de tamaños de poros, así como del material de partida. Entre los métodos de caracterización de los mismos el más ampliamente difundido es la adsorción física de gases (N_2 a 77K y CO_2 a 273K). La adsorción de agua ha sido menos empleada, aunque brinda información sobre la física y la química superficial de dichos sólidos [1]. La comprensión de la adsorción de vapor de agua sobre carbones activados es importante para el diseño de materiales y procesos destinados a la eliminación de contaminantes presentes en corrientes húmedas (reactivos químicos, compuestos tóxicos industriales). El presente trabajo tiene como objetivos: establecer el método de las desecadoras como una técnica sencilla de obtención de isotermas de adsorción de vapor de agua en sólidos porosos en el CIPIMM y utilizar este método para la determinación de diferencias entre las propiedades texturales de carbones. Se emplearon cuatro carbones activados de diferentes características y procedencias [2]. Se observaron diferencias notorias entre las isotermas de agua de carbones con diferentes propiedades texturales.

Palabras clave: Carbones activados, adsorción de agua.

Referencias

- [1] Carrasco-Marín F.; Mueden, A.; Centeno, T.A.; Stoeckli, F.; Moreno-Castilla, C. *Water adsorption on activated carbons with different degrees of oxidation*. J. Chem. Soc. Faraday Trans. (1997), 2211-2215.
- [2] Huertemendía Marín, M. *Activated Carbons from Coconut Shell by Chemical Activation. A First Approach to a Quantitative Relation between Textural Parameters and Preparation Conditions*. Afinidad (2002), 119-126.



EFECTO DE LAS CONDICIONES DE SÍNTESIS EN LAS PROPIEDADES TEXTURALES Y MORFOLÓGICAS DE CARBONES TEMPLADOS TIPO CMK-3 (P-09)

D. Barrera⁽¹⁾ *, M.S. Moreno⁽²⁾, K. Sapag⁽¹⁾

⁽¹⁾ Laboratorio de Sólidos Porosos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, San Luis, ARGENTINA

⁽²⁾ Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica (CAB-CNEA), San Carlos de Bariloche, ARGENTINA

*deicybarrera@unsl.edu.ar

RESUMEN

Diferentes problemáticas medioambientales y energéticas han generado la necesidad de diseñar nuevos materiales para ser usados en proceso más eficientes. Los carbones templados (CT) han atraído gran atención debido a sus propiedades fisicoquímicas las cuáles son útiles en muchas aplicaciones tales como adsorción, captura de gases, almacenamiento de gases, procesos de separación y almacenamiento de energía. Modificaciones en la síntesis de estos materiales permiten un mayor aprovechamiento de sus propiedades texturales, morfológicas y estructurales para diversas aplicaciones como las mencionadas anteriormente. Tres CT se sintetizaron utilizando la técnica de nanocasting usando como plantilla o template un mismo material mesoporoso ordenado del tipo SBA-15 y sacarosa como fuente de carbón, siendo la variación en la cantidad de esta última la responsable de las diferencias observadas en las propiedades texturales y morfológicas de los materiales finales. Estos materiales se caracterizaron texturalmente por adsorción – desorción de N₂ a 77 K y morfológicamente por microscopía electrónica de barrido y microscopía electrónica de transmisión. Los CT obtenidos son “nanorods” de poros cilíndricos formados a partir de la matriz inorgánica. Los materiales finales exhibieron altas superficies específicas entre 800 y 1600 m²/g y los resultados se compararon con las propiedades del material mesoporoso de sílice utilizado como template.

Palabras clave: Carbones templados (CMK-3), Adsorción-desorción de N₂, SEM, TEM



SÍNTESE DE MATERIAIS MESOPOROSOS ORDENADOS TIPO MCM-41 E SBA-15 CONTENDO Fe^{3+} COMO CATALISADORES PARA REAÇÕES DE OXIDAÇÃO (P-10)

I.R.S. Menezes^{(1)*}, R. Mambrini, C. Zanini, J. Villarroel-Rocha⁽²⁾, K. Sapag⁽²⁾, F.C.C. Moura⁽¹⁾

⁽¹⁾ Grupo de Tecnologias Ambientais, Dpto. de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, BRASIL

⁽²⁾ Laboratorio de Sólidos Porosos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA

*i.rhayna@yahoo.com.br

RESUMEN

Materiais Mesoporosos Ordenados (MMOs) têm tido grande importância na ciência dos materiais devido as suas características texturais, como alta área específica e porosidade, estreita distribuição de tamanho dos poros e estrutura porosa ordenada. Como resultado, esses materiais podem ser usados como suportes catalíticos e/ou adsorventes (envolvendo especialmente grandes moléculas) de maneira mais eficiente do que materiais microporosos. Entre os MMOs mais estudados estão a MCM-41 e SBA-15. Estes materiais têm tamanhos de poros entre 2 e 10 nm estruturalmente ordenadas em arranjo hexagonal de canais cilíndricos.

Neste trabalho foram sintetizados a MCM-41 e SBA-15 puros e dopados com Fe^{3+} pelo método sol gel. Os materiais MCM-41 e SBA-15 não dopados também foram utilizados como suporte de catalisador (Fe^{3+}) através de impregnação úmida. Os materiais obtidos foram caracterizados por adsorção-dessorção de N_2 a 77 K, DRX, absorção atômica (para %Fe), FT-IR, Raman, MEV e MET. Finalmente, os materiais foram testados na adsorção e oxidação de Azul de Metileno (AM), utilizando peróxido de hidrogênio como oxidante. A remoção do azul de metileno foi acompanhada por espectroscopia no UV-vis e os resultados indicaram que os MMOs que contém Fe^{3+} foram mais ativos na remoção do AM quando comparados com os materiais puros.

Palabras clave: MCM-41, SBA-15, óxido férrico, remoção de azul de metileno.

Referencias

[1] Barrera, D.; Villarroel-Rocha, J.; Marenco, L.; Oliva, M.I.; Sapag, K. *Non-hydrothermal Synthesis of Cylindrical Mesoporous Materials: Influence of the Surfactant/Silica Molar Ratio*, Adsorption Science & Technology, (2011), 975–977.



ESTIMATION OF DIFFUSION TIME CONSTANTS FOR CO₂ ADSORPTION ON MICROPOROUS MATERIALS (P-11)

S.I. Garcés⁽¹⁾, J. Villarroel-Rocha⁽²⁾, K. Sapag⁽²⁾, S.A. Korili⁽¹⁾, A. Gil⁽¹⁾*

⁽¹⁾ Departamento de Química Aplicada, Universidad Pública de Navarra, Pamplona, ESPAÑA

⁽²⁾ Laboratorio de Sólidos Porosos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA

*andoni@unavarra.es

ABSTRACT

In this work adsorption rates, uptake-curves, of CO₂ on two commercial zeolites (5A and 13X), a commercial MOF (ZIF-8) and a pillared clay (Zr-PILC) [1] were measured volumetrically at 273 K and gas pressure up to 800 mmHg. The diffusion time constants were calculated using the isothermal and non-isothermal models [2] in order to evaluate the heat effects. The results found were discussed from the pore size distribution and the strength of the interaction of CO₂ with the adsorbent, evaluated from the Henry's Law constants. The pressure-dependence of the diffusion time constants was predicted with the Darken-relation, structural [3], and supercritical-structural [4] diffusion models combined with several isotherm models. All materials presented a fast sorption rate of CO₂ and the isothermal models were unable to describe the experimental uptake curves. Therefore, the reliable diffusion time constants were obtained from the heats effects and this constant increased with the pressure and the pore size. The zeolites presented the slow diffusion time constants due to the small pore size and the very strong adsorption with CO₂.

Keywords: Diffusion time constant, sorption rate.

References

- [1] Gil, A.; Korili, S.A.; Vicente, M.A. 1 .Recent advances in the control and characterization of the porous structure of pillared clay catalysts, *Catal. Rev.-Sci. Technol.*, 50, (2008), 153–221.
- [2] Ruthven, D.M. *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*, Jhon Wiley & Sons, New York, (1984).
- [3] Do, D.D. A model for surface diffusion of ethane and propane in activated carbon, *Chem Eng Sci*, 51, (1996), 4145–58.
- [4] Bae, Y.-S.; Lee, C.-H. Sorption kinetics of eight gases on a carbon molecular sieve at elevated pressure, *Carbon*, 43, (2005), 95–107.



MATERIALES MICROPOROSOS PARA EL ALMACENAMIENTO DE METANO E HIDRÓGENO (P-12)

A.A. García Blanco*, A. Vallone, K. Sapag

Laboratorio de Sólidos Porosos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA

*aagarciabl@gmail.com

RESUMEN

La adsorción es una alternativa en estudio para el almacenamiento de gases de interés energético como el metano y el hidrógeno. En este trabajo se analiza experimentalmente la capacidad de almacenamiento de metano e hidrógeno de una serie de materiales microporosos, que incluye: MOF, zeolitas y carbones activados. Se hace énfasis en el análisis del efecto de las interacciones adsorbato-adsorbente y de propiedades texturales tales como el área superficial, tamaño, volumen y geometría de poros.

Palabras clave: Materiales microporosos, Almacenamiento de hidrógeno, Almacenamiento de metano

Referencias

- [1] García Blanco, A.A.; de Oliveira, J.C.A.; López, R.; Moreno-Piraján, J.C.; Giraldo, L.; Zgrablich G; Sapag K. *A study of the pore size distribution for activated carbón monoliths and their relationship with the storage of methane and hydrogen*, Colloids Surf., A, (2010),74 – 83.
- [2] García Blanco, A.A.; Vallone, A.F.; Gil, A.; Sapag, K. *A comparative study of various microporous materials to store hydrogen by physical adsorption*, Int. J. Hydrogen Energy, (2012), 14870-14880.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES MESOPOROSOS TIPO MCM-41 MODIFICADOS CON Ni PARA EL ALMACENAMIENTO DE HIDRÓGENO (P-13)

P. Carraro^{(1,2)*}, V. Elías⁽²⁾, K. Sapag⁽³⁾, M. Oliva⁽¹⁾, G. Eimer⁽²⁾

⁽¹⁾ Instituto de Física Enrique Gaviola - CONICET - Universidad Nacional de Córdoba - ARGENTINA.

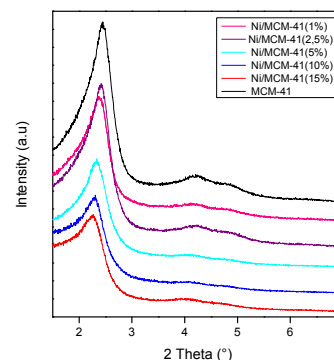
⁽²⁾ CITEQ - CONICET-Universidad Tecnológica Nacional, Regional Córdoba - ARGENTINA.

⁽³⁾-INFAP- CONICET - Universidad Nacional de San Luis - ARGENTINA

*carraro@famaf.unc.edu.ar

RESUMEN

El almacenamiento de hidrógeno, actualmente, constituye una amplia área de investigación. Numerosos materiales están siendo investigados para almacenar hidrogeno en grandes cantidades a temperaturas cercanas a la ambiente ^[1]. Uno de estos materiales mesoporosos es la silica MCM-41, el cual posee una alta área superficial ($<1000 \text{ m}^2/\text{g}$), con un arreglo hexagonal de poros unidimensionales cuyos diámetros son entre 2 y 10 nm. Dopado con diferentes tipos de metales, es utilizado como catalizador o adsorbente de moléculas voluminosas ^[2]. Se encontró que la presencia de Ni en MCM-41 crea sitios favorables para el hidrogeno que mejoran la capacidad de almacenamiento del mismo por un efecto indirecto; esto se ve favorecido por la cantidad de oxido de níquel. También depende fuertemente de las propiedades texturales, encontrando una relación adecuada entre área superficial y tamaño de poro. El objetivo del presente trabajo fue investigar la posibilidad de mejorar la capacidad de almacenamiento de H_2 de los tamices mesoporosos tipo Ni/MCM-41. Se prepararon MCM-41 modificados con Ni por el método de impregnación húmeda ^[3]. La estructura fue caracterizada mediante DRX, adsorción de N_2 , ICP y DRUV-vis. Tanto los patrones de DRX como las isotermas de adsorción de N_2 son características de materiales mesoporosos tipo MCM-41, la cual se conserva luego de la impregnación con Ni. Al incrementar la carga de Ni se produce una pérdida relativa del ordenamiento estructural y un ligero incremento en el parámetro reticular a_0 , lo cual podría ser atribuido a algún grado de incorporación del Ni en la estructura ^[4]. Finalmente por DRUV-vis se infirió la presencia de distintas especies de Ni. ^[5]



Palabras clave: MCM-41, níquel, almacenamiento, hidrógeno.

Referencias

- [1] Satyapal, S.; Petrovic, J.; Read, C.; Thomas, G.; Ordaz, G. *Catalysis Today* 120 (2007) 246–256.
- [2] Elías, V. R.; Vaschetto, E.; Sapag, K.; Oliva, M.; Casuscelli, S. G.; Eimer, G. A. MCM-41-based materials for the photo-catalytic degradation of Acid Orange 7. *Catalysis Today* 172 (2011) 58– 65.
- [3] Eimer, G. A.; Casuscelli, S. G.; Ghione, G. E.; Crivello, M. E., Herrero; E. R. *Applied Catalysis A: General* 298 (2006) 232–242.
- [4] Park, S.; Lee S. *Journal of Colloid and Interface Science* 346 (2010) 194–198.
- [5] Liu, D.; Quek, X. Y.; Cheo, W. N. E.; Lau, R.; Borgna, A.; Yang, Y. *Journal of Catalysis* 266 (2009) 380–390.



GAS SOLUBILITY IN MICROPOROUS POLYMERS (P-14)

M.G. García*, J. Marchese, N.A. Ochoa

Laboratorio de Membranas, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA

*maggarcia@unsl.edu.ar

RESUMEN

Polymers with intrinsic microporosity constitute promising materials for the production of gas selective membranes. They feature porosity derived from inefficient packing due to a combination of rigid segments and sites of contortion (stiff units with spiro-center) within the macromolecular backbone of the polymer [1]. In this work, new blend membranes of polymers with intrinsic microporosity (PIM-A and PIM-B) and polyetherimide (PEI, ULTEM 1000) were prepared for H₂ separation applications. All membranes were characterized through N₂ and CO₂ adsorption experiments and gas permeability assays (H₂, N₂, O₂, CH₄, CO₂) [2]. PIM-B showed higher surface area (BET method) than PIM-A. High solubility coefficients (S) derived from permeability measurements improved the H₂ selectivity of blend membranes. This result was linked to the preferential sorption of certain gases such as CO₂ in PIM-A and PIM-B [3].

Palabras clave: microporosity, polymer blends, solution-diffusion model, gas permeability

Referencias

- [1] McKeown NB, Hanif S, Msayib K, Tattershall CE, Budd PM. Porphyrin-based nanoporous network polymers, *Chem Commun*, (2002), 2782–2783.
- [2] Ritter N, Senkovska I, Kaskel S, Weber J. Intrinsically Microporous Poly(imide)s: Structure-Porosity Relationship Studied by Gas Sorption and X-ray Scattering, *Macromolecules*, (2011), 2025–2033.
- [3] Budd PM, Msayib KJ, Tattershall CE, Ghanema BS, Reynolds KJ, McKeown NB, Fritsch D. Gas separation membranes from polymers of intrinsic microporosity, *J Membr Sci*, (2005), 263–269.

CAPTURA DE CO₂ EN SBA-15 FUNCIONALIZADA CON APTES. ESTUDIO DE MODELOS DE ADSORCIÓN (P-15)

E. Vilarrasa-García⁽¹⁾, J.A. Cecilia⁽¹⁾, S.M.L. Santos⁽²⁾, D.C.S. Azevedo⁽²⁾, C. Cavalcante Jr.⁽²⁾, A. Jiménez-López⁽¹⁾, E. Rodríguez-Castellón^{(1)*}

⁽¹⁾ Departamento de Química Inorgánica, Cristalografía y Mineralogía, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, 29071, Málaga, ESPAÑA

⁽²⁾ Departamento de Ingeniería Química, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, bl. 709, 60455-760, Fortaleza, BRASIL

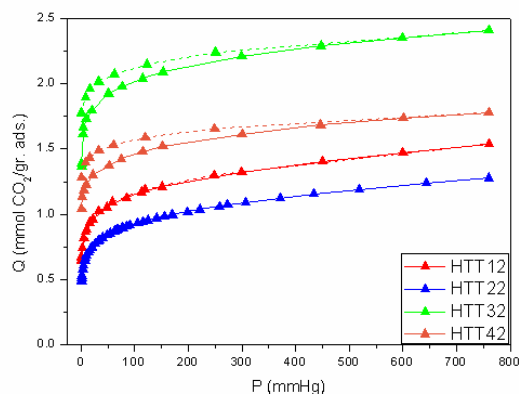
*castellon@uma.es

RESUMEN

La captura de CO₂ es una propuesta técnica para disminuir las emisiones de dióxido de carbono a la atmósfera, el cual genera efecto invernadero. Los sólidos adsorbentes mesoporosos impregnados o anclados con grupos amino-derivados han mostrado gran capacidad de captura de CO₂, capacidad de regeneración y alta estabilidad térmica.

Se han sintetizado diversos sólidos mesoporosos tipo SBA-15 bajo condiciones hidrotermales¹ con una alta superficie específica y amplio volumen de poro. Estos materiales fueron funcionalizados con 3-aminopropil-trietoxi-silano (APTES), evaluándose el grado de almacenamiento de CO₂, así como el grado de regeneración y su ajuste a modelos de adsorción.

SBA-15	S_{BET} (m^2g^{-1})	V_p (cm^3g^{-1})	D_p (nm)
HTT1	720	1.3	7
HTT2	679	2.4	13.6
HTT3	433	1.0	13.0
HTT4	460	1.3	10.8



Palabras clave: Captura de CO₂, SBA-15, APTES

Referencias

[1] Fulvio, PF.; Pikus, S.; Jaroniec, M. *Tailoring properties of SBA-15 materials by controlling conditions of hydrothermal synthesis*, Journal of Material Chemistry 47 (2005) 5049-5053.

EVALUACIÓN DE ZIF-4(ZN) Y ZIF-4(CO) PARA SU USO EN LA SEPARACIÓN DE MEZCLAS DE H₂-CO₂ Y CH₄-CO₂ (P-16)

C. Sámano Alonso¹, G. Autié Castro², J. Hernández Obregón¹, E. Reguera Ruiz^{1,2}, M.A. Autié Pérez², D.C.S. Azevedo³, C.L. Cavalcante Jr.³, E. Rodríguez Castellón⁴

⁽¹⁾ Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada. Instituto Politécnico Nacional. México.

⁽²⁾ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales. Universidad de la Habana. Cuba.

⁽³⁾ Departamento de Ingeniería Química, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, BRASIL

⁽⁴⁾ Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. Málaga. España.

*castellon@uma.es

RESUMEN

Los enrejados metal orgánicos tipo zeolitas, ZIFs, han surgido en la última década como un nuevo tipo de materiales cristalinos porosos que combinan propiedades como la presencia de microporos uniformes, superficies elevadas, y una excepcional estabilidad térmica y química, lo que los convierte en candidatos ideales para aplicaciones de separación de gases por ejemplo CO₂, H₂ y CH₄ [1]. En el presente trabajo se evaluaron las propiedades separadoras de dos materiales de esta familia; intercambiando los metales (Zn y Co) a los que se coordinan los grupos imidazoles que forman el enrejado poroso. El estudio se realizó por cromatografía gaseosa inversa (CGI). Dicha técnica, se ha utilizado para la caracterización superficial de diferentes materiales en condiciones dinámicas de flujo [2-4]. Como respuesta se obtiene el tiempo de retención (*tr*), parámetro primario para calcular los parámetros termodinámicos (*Q_{ads}*) que determinan la adsorción y separación de las mezclas estudiadas. Se obtuvo que ambos materiales fueron capaces de separar las mezclas estudiadas adquiriéndose mayores tiempos de retención para en el compuesto de cobalto. Las separaciones se basan no en aspectos estéricos (*d_{cCH4}*= 0,38 nm; *d_{cCO2}*= 0,33 nm) sino en el momento cuadrupolar que presenta la molécula de CO₂ (0.64) respecto a valores nulos para el H₂ y CH₄ que se traduce en interacciones más fuertes con la superficie y mayores tiempos de retención, lo cual fue confirmado con los valores de *Q_{ads}* obtenidos (Tabla 1).

Muestra	Separación H ₂ -CO ₂		Separación CH ₄ -CO ₂	
	<i>Q_{ads}</i> H ₂	<i>Q_{ads}</i> CO ₂	<i>Q_{ads}</i> CH ₄	<i>Q_{ads}</i> CO ₂
ZIF-4(Zn)	9,5	24,6	10,0	28,4
ZIF-4(Co)	10,2	26,3	11,6	31,0

Tabla 1: Calores de adsorción (kJ/mol) para cada especie de las separaciones H₂-CO₂ y CH₄-CO₂ en ZIF-4(Zn) y ZIF-4(Co).

Palabras clave: Enrejados metal orgánicos tipo zeolitas, Cromatografía gaseosa inversa, separación.

Referencias

- [1] Thornton A. W., Dubbeldam D., Liu M. S., Ladewig B. P., Hill A. J., Hill M. R., **Energy Environ. Sci.**, **5**, (2012), 7637-7646 [2] Rjiva N., Nardin M., Dréan J-Y. Frydrych R. J., *Colloid Interf. Science*, 314, (2007) 373-380.
[3] Batko K., Voekel A. J., *Colloid Interf. Science*, 315, (2007) 768-771.
[4] Galdámez J. R., Danner R. P., Duda J.L., *J. Chromatogr. A* 1157 (2007) 399-407.



PORE SIZE CHARACTERIZATION STRATEGIES USING ISOTHERMS OF DIFFERENT PROBE-GAS (P-17)

P. Silvino, D. Gonçalves, R. Gonçalves, S. Lucena, D. Azevedo*

Grupo de Pesquisa em Separações por Adsorção – GPSA, Dept. de Eng. Química, Centro de Tecnologia, Universidade Federal do Ceará, BRASIL

*lucena@ufc.br

ABSTRACT

Pore size distribution (PSD) is an essential textural data of an activated carbon (AC) sample, it is a characteristic combination of different pore sizes which can represent the molecular framework of sample. Surface area, total volume of pores and adsorptive capacity can be estimated by PSD. To obtain the PSD for an AC is necessary to compare its experimental isotherm with a local isotherm database (Kernel), obtained for different size pores via molecular simulation. This distribution must be unique for a given sample, independent of the probe-gas used, however a PSD obtained for a gas do not always reproduce the adsorptive behavior of that sample with other gases. Adsorption isotherms of WV-1050 AC, with nitrogen at 77 K, carbon dioxide at 298 K and methane at 303 K where analyzed, yielding its respective PSD based on Kernels generated via grand canonical Monte Carlo (GCMC) simulations. The PSDs obtained for nitrogen and carbon dioxide was used, individually, to reproduce the three experimental isotherms, yielding significant deviations. Trough volume normalization, the isotherm fitting was significantly enhanced.

Keywords: Molecular Simulation, Adsorption, Pore Size Distribution.



ISOSTERIC HEATS OF CARBON DIOXIDE ADSORPTION ON PRISTINE AND AMINE-FUNCTIONALIZED SBA-15 SILICA: AN EXPERIMENTAL STUDY (P-18)

L. Munguía, R. Ojeda, J.M. Esparza, A. Domínguez*

Department of Chemistry, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186-09340, México D.F. Telephone: (+52-55) 58044672

*doar@xanum.uam.mx

ABSTRACT

This study investigates the adsorption of CO₂ on SBA-15 ordered mesoporous materials, for pristine and APTES functionalized substrates. The structural parameters of the resultant adsorbents were obtained from the analysis of N₂ sorption isotherms at 76 K and from XRD and TEM studies. The adsorbent surface fractal dimension was calculated from the N₂ isotherms using both, the fractal isotherm equation derived from the Frenkel-Halsey-Hill theory and the Neimark equation based on thermodynamics. With both models, it was found that the surface roughness was nearly constant for both pristine and modified solids, despite a large reduction of the BET surface area and pore volume when APTES molecule was introduced. CO₂ adsorption on model SBA-15 substrates has been measured at temperatures in the range 263-303 K. Analysis of the isosteric heat of adsorption obtained from CO₂ adsorption isotherms revealed that this thermodynamic characteristic provides important information on the degree of change of the functionalized adsorbent material. Then, this quantity can be considered as a complementary guide for these investigations as well as for the characterization of the porous structure and its influence on the sorption behavior of SBA-15 amino modified materials.

Keywords: Adsorption, isosteric heat, SBA-15, surface functionalization.

ELIMINACIÓN DE METALES PESADOS USANDO HIDRÓXIDOS DOBLES LAMINARES DE Ca Y Al (P-19)

R. Rojas⁽¹⁾, M.L. Parello⁽¹⁾, C.E. Giacomelli^{(1)*}

⁽¹⁾ INFIQC-CONICET, Departamento de Físicoquímica, Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Ciencias Químicas, Argentina.

*rrojas@fcq.unc.edu.ar

RESUMEN

Los hidróxidos dobles laminares (LDHs) presentan laminas cargadas positivamente, lo que permite la intercalación de aniones, como el ácido etilendiamintetraacético (edtaH_2^{2-}), capaces de captar cationes de metales pesados que quedan atrapados en la interlámina^{1,2}. Además, presentan reacciones de disolución que producen la liberación de OH^- y la precipitación de dichos cationes metálicos como hidróxidos. En este trabajo, se estudia la estructura y la reactividad de LDHs de Ca y Al intercalados con nitrato o $[\text{Ca}(\text{edta})]^{2-}$ para determinar su capacidad de eliminación de cationes pesados (Cu^{2+} , Cd^{2+} , Pb^{2+}). En una primera instancia, se sintetizaron y caracterizaron estructuralmente las distintas muestras de LDHs. Posteriormente, se evaluó la reactividad ácido-base de los sitios superficiales y se realizaron las isotermas de adsorción de los cationes pesados seleccionados. Así mismo, se determinó la dependencia de la capacidad de eliminación con el pH del medio. Los resultados obtenidos indican que los LDHs de Ca y Al, en presencia y ausencia de $[\text{Ca}(\text{edta})]^{2-}$ presentan una alta capacidad de eliminación de cationes Cu^{2+} (Figura 1), Pb^{2+} , Cd^{2+} por su alta afinidad por los mismos. Esto es debido a la acción buffer ácido-base del sólido, lo cual induce la precipitación de los hidróxidos de estos metales, bien formando parte de un hidróxido doble laminar, o como una fase separada.

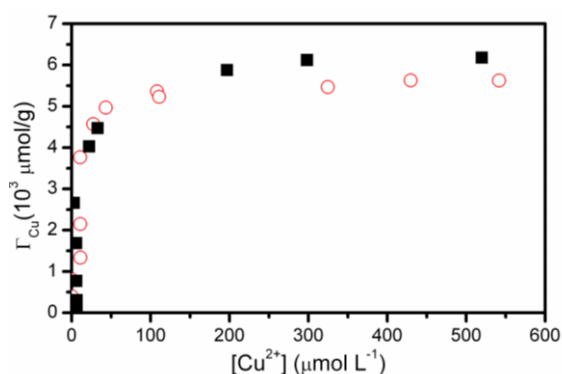


Figura 1. Eliminación de Cu^{2+} (Γ_{Cu}) frente a la concentración de Cu^{2+} en equilibrio para dispersiones 50 mg/L de LDHs intercalados con nitrato (!) y $[\text{Ca}(\text{edta})]^{2-}$ (-)

Palabras clave: Hidróxidos dobles laminares, Metales pesados, Remediación

Referencias

- [1] Pérez, M. R.; Pavlovic, I.; Barriga, C.; Cornejo, J.; Hermosin, M. C.; Ulibarri, M. A. *Uptake of Cu^{2+} , Cd^{2+} and Pb^{2+} on Zn-Al layered doublehydroxide intercalated with edta*, Applied Clay Science, (2006), 245-251.
- [2] Rojas, R.; Pérez, M. R.; Erro, E. M.; Ortiz, P. I.; Ulibarri, M. A.; Giacomelli, C. E. *EDTA modified LDHs as Cu^{2+} scavengers: Removal kinetics and sorbent stability*, J. Colloid Interface Science, (2009), 425-431.

ADSORCIÓN DE UNA PROTEÍNA MODELO EN MATRICES DE EUDRAGIT (P-20)

E.C. Arrúa, B. Farruggia, D. Spelzini *

⁽¹⁾ Laboratorio de Físicoquímica Aplicada a Bioseparación, U.N.R., FCBioyF, ARGENTINA

*dspelzini@fbioyf.unr.edu.ar

RESUMEN

La adsorción de proteínas en adsorbentes particulados es utilizada como metodología de purificación [1]. Las matrices de adsorción suelen ser insumos caros que limitan la utilización de estas tecnologías. Los Eudragit (Eu) son polielectrolitos derivados del acrilato que portan cargas positivas (EuE y EuEPO) o cargas negativas (EuL y EuS). El objetivo de este trabajo fue elaborar matrices adsorbentes utilizando polielectrolitos de Eu y evaluar distintas condiciones de trabajo: carga eléctrica del adsorbato y fuerza iónica del medio sobre la capacidad de estas matrices para adsorber albumina sérica bovina. Los adsorbentes fueron elaborados a partir de soluciones acuosas de los polielectrolitos que fueron rociadas sobre soluciones de NaOH (EuE y EuEPO) o HCl (EuL y EuS) [2], luego fueron lavados y equilibrados al pH y fuerza iónica de trabajo con buffer acetato-fosfato-tris (AFT). En el proceso de adsorción en lote se incubaron los adsorbentes con concentraciones crecientes de BSA en una relación 0,1mg Eu:1mL solución de BSA. Las muestras fueron agitadas a 60 r.p.m. a 25°C durante 24 horas. Se determinó la concentración de BSA al inicio y luego de alcanzado el equilibrio por abs. a 280 nm. Las isothermas obtenidas fueron ajustadas al modelo de Langmuir y los valores de q_{max} se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 1: capacidad de adsorción (q_{max}), los valores se informan en mg BSA/g Eu. Buffer AFT 25 mM

pH 3		pH 5		pH 7		pH 9	
EuL	EuS	EuL	EuS	EuE	EuEPO	EuE	EuEPO
9,8	16,5	7,8	21,5	4,2	3,7	1,9	4,4

Se seleccionaron el EuL y el EuS a pH 5 para ensayar el efecto de la fuerza iónica con NaCl en un rango de 0 a 1 M sobre q_{max} y se observó que alcanza un valor de máximo con NaCl 0,5 M de 20,9 mg BSA/g EuL y 30,3 mg BSA/g EuS. Los resultados indicarían que la interacción entre la BSA y el Eu a pH 5 sería por efecto hidrofóbico.

Palabras clave: polielectrolitos, proteínas, Eudragit

Referencias

- [1] Thömes, J. Fluidized bed adsorption as a primary recovery step in protein purification, Adv Biochem Eng Biotechnol, 58 (1997), 185-230.
- [2] Cappella, L.V.; Boeris, V.; Picó G. A simple method of chymotrypsin concentration and purification from pancreas homogenate using Eudragit® L100 and Eudragit® S100, J Chrom B (2011), 879, 1003–1007.



ADSORCIÓN DE AZUL DE METILENO (MB) Y TETRAETILENPENTAMINACOBRE(II) ([Cu-TETREN]²⁺) (P-21)

S.E. Pecini, M. Avena*

INQUISUR. Departamento de Química. Universidad Nacional del Sur. (8000) Bahía Blanca.
Avda. Alem 1253.

* mavena@uns.edu.ar

RESUMEN

La capacidad de intercambio catiónico (CEC) mide la capacidad que tienen los minerales para intercambiar cationes con el medio. Existe una larga lista de trabajos enfocados en determinar la CEC de arcillas, en los cuales se discute la validez de resultados obtenidos por diferentes métodos.

El objetivo de este trabajo fue estudiar la adsorción sobre montmorillonita de dos especies, Azul de Metileno (MB) y tetraetilenpentaminacobre (II) ([Cu-tetren]²⁺). Los resultados se compararon con la CEC obtenida en forma teórica a partir de su fórmula estructural (1,3mEq/g). Se realizaron estudios electrocinéticos para verificar si todos los sitios de intercambio son o no neutralizados por los adsorbatos y dilucidar si cambios en el pH ejercen alguna influencia en las partículas a medida que sus sitios de intercambio son neutralizados.

Los resultados mostraron que las isotermas de adsorción de MB y [Cu-tetren]²⁺ alcanzaron la saturación en 2 mEq/g [1] y 1,24 mEq/g respectivamente. Los estudios de movilidades electroforéticas de la montmorillonita con diferentes cantidades de MB adsorbido mostraron que la neutralización de la carga negativa ocurre en 1,35 mEq/g y que excesos de MB provocan la inversión de la carga de valores negativos a valores positivos [2]. Por otro lado con [Cu-tetren]²⁺ se alcanza valores cercanos a la neutralidad cuando se han adsorbido 1,24 mEq/g, y excesos del complejo no producen inversión de la carga.

Finalmente las partículas de montmorillonita con sus cargas estructurales neutralizadas presentaron movilidades electroforéticas dependientes del pH. Esto hizo posible la determinación del punto isoeléctrico de los bordes, que es de aproximadamente 5.

Palabras clave: montmorillonita, CEC, adsorción, punto isoeléctrico.

Referencias

- [1] Czímerová, A., Bujdák, J., Dohrmann, R. *Traditional and novel methods for estimating the layer charge of smectites*, Appl. Clay Sci, (2006), 2-13.
[2] Marras, S.I., Tsimpliaraki, A., Zuburtikuis, I., Panayiotou, C. *Thermal and colloidal behavior of amine-treated clays: The role of amphiphilic organic cation concentration*. J. Colloid Interface Sci, (2007), 520-527.



ESTABILIZACIÓN TÉRMICA DE FÁRMACOS INCORPORADOS EN NANOARCILLAS DE Mg-Al (P-22)

S. Mendieta⁽¹⁾*, C. Pérez⁽¹⁾, M. Crivello⁽¹⁾

⁽¹⁾ CITEQ, Centro de Investigación y Tecnología química, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad regional Córdoba. Córdoba – Argentina.

*smendieta@scdt.frc.utn.edu.ar, silname@hotmail.com

RESUMEN

Las nanoarcillas de Mg-Al están compuestas por láminas del tipo brucita cargados positivamente compensadas por aniones y moléculas de agua que se alojan en espacio interlamina. Dichas nanoarcillas tienen aplicación en el campo farmacéutico como antiácido, estabilizante y sólido anfitrión de fármacos [1]. En este trabajo se incorporó un fármaco antiinflamatorio no esteroideos γ -Indometacina. El mismo se localizó entre las láminas positivas mediante intercambio aniónico, reemplazando los aniones cloruros iniciales de síntesis. Se estudió la incorporación sobre nanoarcillas, sólido anfitrión, sintetizadas por el método clásico de coprecipitación; variando el tiempo de envejecimiento. En cuanto al intercambio aniónico el mismo se realizó modificando el tiempo de contacto [1]. La incorporación del mismo se verificó mediante difracción de rayos X, analizándose el primer pico de difracción el cual provee la información de la distancia interlamina. Mediante espectrofotometría infrarroja con transformada de Fourier, se observó la banda perteneciente al ión carboxilato el cual indica que el fármaco se encuentra en su forma aniónica e incorporada, junto con el cambio de morfología hacia α -indometacina [1]. La evaluación de la estabilización térmica de la indometacina incorporada se estudió mediante análisis calorimétrico diferencial de barrido. Se observó que la nanoarcilla estabiliza al fármaco incorporado aumentando su temperatura de descomposición, en 100°C aproximadamente, por encima de su temperatura de fusión, independientemente del sólido anfitrión utilizado y el tiempo de contacto de intercambio [2].

Palabras clave: Nanoarcilla, Fármacos, Incorporación, Estabilización térmica.

Referencias

- [1] Mendieta, S.; Pérez, C.; Crivello, M. *Intercalation of anti-inflammatory drugs Sodium Indomethacin into nanocomposites of Mg-Al. Structural characterization*. Procedia Materials Science 1 (2012) 580 – 587.
- [2] Xia, S-J.; Ni, Z-M.; Xu, Q.; Hu, B-J.; Hu, J. *Layered double hydroxides as supports for intercalation and sustained release of antihypertensive drugs*. Journal of Solid State Chemistry 181 (2008) 2610– 2619.

ADSORCION DE HUMEDAD POR UNA BENTONITA PURIFICADA (P-23)

N. Castrillo^(1, 2)*, A. Mercado^(2, 3), C. Volzone⁽⁴⁾

⁽¹⁾ INQUI-CONICET, Universidad Nacional de Salta, ARGENTINA

⁽²⁾ CIUNSa, Universidad Nacional de Salta, ARGENTINA

⁽³⁾ Fac. de Cs. Exactas, Universidad Nacional de Salta, ARGENTINA

⁽⁴⁾ CETMIC, CCT- La Plata-CONICET, CIC PBA, ARGENTINA

*ncastrillo@unsa.edu.ar

RESUMEN

Se investigó el uso de una bentonita argentina purificada, denominada BQ_p, proveniente de la provincia de Neuquén, en la remoción de humedad. Después de la homoionización con NaCl se realizaron tratamientos de purificación. Resultados de caracterización del material (DRX; ATD-TG; IR), realizados con anterioridad [1], confirmaron que el tratamiento de purificación ha enriquecido el contenido arcilloso. El difractograma de la muestra natural presentó además de las reflexiones características del mineral esmectita, fases asociadas como cuarzo (26,65 °2θ) y yeso (7,04 °2θ) que actúan como impurezas, mientras que el difractograma de la muestra purificada presentó picos más agudos correspondiente al espaciado d(001) de la esmectita con un valor 2θ igual a 15,65 y reducción de las impurezas. Dicho tratamiento permitiría modificar las propiedades de adsorción [2]. Para los ensayos de adsorción, la muestra BQ_p fue previamente secada a 70°C por 24 horas. Los estudios de adsorción se realizaron colocando muestras en desecadores de vidrio bajo el control de temperatura y Humedad Relativa (HR) a fin de evaluar las características de adsorción. El ensayo se siguió mediante pesadas consecutivas para evaluar el contenido de agua [3]. El equilibrio se logró aproximadamente luego de las 96 horas. Las cantidades de agua adsorbidas se indican en la Tabla 1. Los resultados obtenidos indican una alta afinidad adsorbente / adsorbato manifestando el potencial uso de estos adsorbentes para la eliminación de humedad a temperatura ambiente. Dichos resultados muestran que la adsorción aumenta con la concentración del mineral esmectita y con el aumento de la HR del ambiente.

Tabla 1. Cantidad de agua adsorbida en BQ_p.

% HR	11 LiCl	33 MgCl ₂	43 K ₂ CO ₃	53 Mg(NO ₃) ₂	69 KI	75 NaCl	81 KBr	84 KCl	97 K ₂ SO ₄
Agua adsorbida (g/g)	0,037	0,088	0,099	0,117	0,118	0,152	0,192	0,232	0,438

Palabras clave: Humedad, Arcilla purificada, Adsorción

Referencias

- [1] Castrillo N.; Mercado A. y Volzone C. *Caracterización de bentonitas para su aplicación como desecantes*, Ciencia y Tecnología Ambiental. Un Enfoque Integrador, (2012), 320 – 325.
- [2] Castrillo N.; Mercado A. y Volzone C. *Modelo Cinético de Adsorción de Agua en Bentonitas*, Libro de las XI Jornadas Argentinas de Tratamiento de Minerales, (2012), 55 – 60.
- [3] Norma española UNE-EN ISO 12571. Prestaciones higrotérmicas de los productos y materiales para edificios. Determinación de las propiedades de sorción higroscópica (ISO 12571: 2000)



ADSORCIÓN DE COLORANTE TEXTIL YELLOW GR EMPLEANDO UNA ESMECTITA NATURAL Y TRATADA CON HDTMA (P-24)

S. Martinez Stagnaro⁽¹⁾*, C. Volzone⁽²⁾. L. Huck⁽²⁾

⁽¹⁾Asentamiento Universitario Zapala, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue, 12 de Julio y Rahue, (8340), Zapala, Neuquén, Argentina

⁽²⁾Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica – CETMIC (CICPBA, CCT CONICET La Plata) C.C. 49, Cno. Centenario y 506, (1897) M. B. Gonnet, Buenos Aires, Argentina

*syms.05@hotmail.com

RESUMEN

Durante el proceso de tinción de las fibras pueden generarse descargas de igualadores, dispersantes, antiespumantes, estabilizadores de pH, secuestrantes de dureza y colorantes [1], se estima que del 10 al 20% de los tintes empleados, son arrojados en las aguas de desecho [2]. Estas sustancias, encargadas de impartir el color a las fibras, son muy solubles en agua, persistentes y de baja degradabilidad. Además, los cromóforos que constituyen sus estructuras, son potenciales formadores de aminas aromáticas tóxicas, y en algunos casos pueden producir mutaciones a especies altamente dañinas [2,3]. Con la finalidad de minimizar los efectos adversos de éstos compuestos, se trató una solución de colorante textil denominado Yellow GR, compuesto por grupos cromóforos tipo azo (-N=N-), con un mineral esmectítico. Los ensayos fueron realizados sobre el sustrato natural y modificado orgánicamente con HDTMA, con una relación sólido/líquido de 1% en agitación y temperatura ambiente durante un rango de tiempo de 1 a 72 horas, con el objetivo de evaluar la cinética en el fenómeno de adsorción y relacionar el mecanismo de retención de acuerdo a la modificación estructural del mineral.

Palabras clave: Adsorción, Colorante, Esmectita.

Referencias

- [1] International Resources Group (IRG) & Centro Nacional de Producción más limpia de Honduras (CNP+LH). *Guía de buenas prácticas ambientales para la industria textil*. Guía ambiental, (2009), pp 23-24.
- [2] M. E. Juárez Rosete. *Tratamiento de efluentes generados por la industria textil, aplicando sistemas biotecnológicos, químicos y electroquímicos*. Centro de Investigación en Biotecnología Aplicada - Instituto Politécnico Nacional. Tesis de Posgrado, México (2008).
- [3] S. J. Allen and B. Koumanova. *Decolourisation of Water/Wastewater using Adsorption (Review)*. Journal University of Chemical Technology and Metallurgy. Vol 40, (2005), pp 175-192.

ASOCIACIÓN CLINOPTILOLITA-FERRIHIDRITA PARA LA ADSORCIÓN DE As EN AGUAS (P-25)

E.L. Soto^{(1)*}, M.J. González^(2,3), I.L. Botto⁽²⁾

⁽¹⁾ CINDECA-CCT-La Plata, Universidad Nacional de La Plata, Fac. Cs. Exactas, ARGENTINA

⁽²⁾ CEQUINOR-CCT-La Plata, Universidad Nacional de La Plata, Fac. Cs. Exactas, ARGENTINA

⁽³⁾ INREMI-CICPBA, Universidad Nacional de La Plata, Fac. Cs Naturales y Museo, ARGENTINA

*els@química.unlp.edu.ar

RESUMEN

Valores elevados de arsénico en aguas subterráneas conducen a problemas sanitarios. El empleo de adsorbentes naturales en la eliminación del contaminante es una técnica simple y efectiva. Se reportan los resultados del empleo de toba zeolitizada rica en clinoptilolita, optimizando el proceso de adsorción mediante activación química por formación de ferrihidrita "in situ" (1). Se evalúan las variaciones texturales y topográficas del mineral original (Z) y activado (ZA), procediendo a la caracterización fisicoquímica (DRX, ICP-AS-MS, SEM-EDS y BET). La efectividad del proceso de remoción se determina mediante la disminución del contenido de As de soluciones acuosas patrones ($1000 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$). Como se indica en la tabla, la activación produce un aumento del área superficial asociado a una disminución del diámetro de poro promedio (DPP). El empleo de la expresión de Avnir-Jaroniec, revela un pequeño incremento de la dimensión fractal (Ds), indicando que el agregado de ferrihidrita no conduce a la formación de microporos. La muestra activada resulta efectiva en la disminución del contenido de arsénico, llegando al valor sugerido por la OMS ($10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$). Para una relación líquido/sólido=10 el proceso permite 17 ciclos de tratamiento equivalentes a una retención de $178,10 \mu\text{g As/g}$ de mineral. Por el contrario, el As traza contenido en el material vulcanoclástico no modificado (6 ppm) es lixiviado, incrementando la concentración del contaminante en la solución. La ligera modificación química genera propiedades de adsorción que significan una alternativa promisorio en el desarrollo de tecnologías de bajo costo para el tratamiento de aguas.

Principales propiedades texturales y contenido de hierro

Muestra	S_{BET} ($\text{m}^2\cdot\text{g}^{-1}$)	DPP (Å)	Ds	Fe_2O_3 (%)
Z	9,5	189	2,57	0,64
ZA	35,9	101	2,62	4,00

Ferrihidrita: S_{BET} : $322,4 \text{ m}^2\cdot\text{g}^{-1}$, DPP: 28 Å.

Palabras clave: clinoptilolita, modificación química con hierro, As en aguas

Referencias

[1] U. Schwertmann & R. Cornell, 2000. Iron Oxides in the Laboratory: Preparation and Characterization. Second Edition. Weinheim, Germany, Ed. WILEY-VCH.



MECANISMOS DE ADSORCIÓN EN ORGANOARCILLAS (P-26)

P.M. Naranjo⁽¹⁾*, E.M. Farfán Torres^(1,2)

⁽¹⁾ Instituto de Investigaciones para la Industria Química (INiQUI – CONICET), Salta, ARGENTINA

⁽²⁾ Universidad Nacional de Salta, Facultad de Ciencias Exactas, ARGENTINA

*pnaranjo@unsa.edu.ar

RESUMEN

Las arcillas son ampliamente utilizadas como adsorbentes, por su gran hidrofiliidad y su afinidad por compuestos catiónicos. Intentando aprovechar sus propiedades como adsorbente (bajo costo, alta superficie específica, alta estabilidad química, entre otros) en la adsorción de compuestos orgánicos apolares, surge la síntesis de organoarcillas. Estas se obtienen por intercambio catiónico de los cationes interlaminares por cationes orgánicos [1].

En el presente trabajo se emplearon organoarcillas como adsorbentes de 2-clorofenol. A partir de las isotermas de adsorción se dilucidaron cambios en el mecanismo de adsorción: para bajas Cargas de Surfactante (CS) se observan isotermas cóncavas hacia arriba, indicando adsorción cooperativa, es decir que existe mayor afinidad sorbato-sorbato que sorbato-sorbente [2]; mientras que para la organoarcilla con mayor CS se observa una isoterma prácticamente lineal, comúnmente denominada isoterma de partición, ya que el fenómeno de adsorción puede interpretarse como una partición entre el medio acuoso y la organoarcilla (medio orgánico). Con fines comparativos se estudia la adsorción de Pb^{2+} , donde la cantidad adsorbida disminuye a medida que aumenta la CS y las isotermas de adsorción son tipo Langmuir, de acuerdo a una adsorción por intercambio catiónico.

Estos resultados permiten diseñar sólidos con afinidad hacia sustancias específicas, por ejemplo, en la adsorción de Eriocitrina, un flavonoide cítrico que tiene propiedades antioxidantes y se emplea en alimentos y preparaciones farmacéuticas. En vista de esto, se sintetizó una organoarcilla empleando una arcilla montmorillonítica y el aminoácido L-Lisina. Se observó adsorción de la eriocitrina en la organoarcilla, y esta mantuvo su actividad antioxidante.

Palabras clave: Montmorillonita, Organoarcilla, Hidrofiliidad, Isoterma de Adsorción

Referencias

[1] Betega de Paiva, L.; Morales, A.; Valenzuela Díaz, F. *Organoclays: Properties, preparation and applications*, Applied Clay Science, (2008), 8–24.

[2] Lee, J.; Choi, J.; Park, J. *Simultaneous sorption of lead and chlorobenzene by organobentonite*, Chemosphere, (2002), 1309–1315.



CARACTERIZACIÓN DE MONTMORILLONITAS TRATADAS TÉRMICA O MECÁNICAMENTE Y CON ADSORCIÓN DE Ag Y Cu PARA USO BACTERICIDA EN AGUAS (P-27)

J. Lamarra⁽¹⁾, R.M. Torres Sánchez⁽¹⁾ *

⁽¹⁾ CETMIC, Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica, CIC-CONICET La Plata, Gonnet, Argentina.

*jlamarra11@gmail.com

RESUMEN

Una de las mayores dificultades a la hora de gestionar los recursos hídricos se basa en la contaminación generada por microorganismos patógenos. Para remediar esta situación se plantea la utilización de materiales de bajo costo, como son las Montmorillonitas (MMT) sobre las cual es se adsorbe Ag o Cu cuyas propiedades bactericidas fueron evaluadas previamente [1-2]. En trabajos anteriores se evidenció la mayor capacidad bactericida de Ag-MMT tratada térmica o mecánicamente [3]. En este trabajo se sometió una MMT a molienda durante 300 segundos (MMT300S) o a calcinación a 550 °C (MMT550), con posterior adsorción de Ag, Cu o Ag y Cu. Los productos así obtenidos fueron caracterizados, para evaluar su aplicación bactericida frente a *E. Coli*. Se evidenció la formación de sitios de adsorción en los productos a través de resultados de superficie específica por adsorción de vapor de agua (*Sw*), donde se postula la adsorción tanto de Ag como de Cu. Los espectros de DRX evidenciaron una fuerte rehidratación producto de la inserción de los metales en la intercapa de la MMT550. Los valores de potencial Zeta en las muestras MMT550 y MMT300S indicaron una disminución de las cargas negativas superficiales con respecto a la MMT, en tanto que para todas las muestras con Ag y/o Cu adsorbido se evidenció un efecto contrario. El análisis de los lixiviados de MMT550 y MMT300S mostraron una menor desorción de ambos cationes y una dependencia con los electrolitos presentes (en un agua de río simulada), para la Ag⁺ mientras que para el Cu no se evidenció. Estos comportamientos plantean una mayor capacidad bactericida de estos materiales que la obtenida en MMT con Ag, Cu y ambos cationes.

Palabras clave: Montmorillonita, Ag y Cu.

Referencias

- [1] Malachová K., Praus P., Rybková Z., Kozák O. 2011. Antibacterial and antifungal activities of silver, copper and zinc montmorillonites. *Appl. Clay Sci.* 53, 642–645.
- [2] Sadhucharan M., Shilpa S., Madhuchanda B., Siddhartha Sankar G., Arun C., Anumita P. Iodine-Stabilized Cu Nanoparticle Chitosan Composite for Antibacterial Applications. 2012. *Appl. Mater. Interf.* 4, 1313–1323.
- [3] Magaña S., Quintana P., Aguilar D., Toledo J., Angeles J., Cortes A., Leon A., Freile Y., Lopez T., Torres Sánchez R.M. 2008. Antibacterial activity of montmorillonites modified with silver. *J. Molec. Catal. A* 281, 192–199.



ANÁLISIS DE LA EFECTIVIDAD DE LEX Y ESCOBAJO DE UVA PARA LA REMOCIÓN DE PLOMO (P-28)

M. Gimenez⁽¹⁾*, F. Sardella⁽¹⁾, C. Deiana⁽¹⁾, K. Sapag⁽²⁾

⁽¹⁾ INSTITUTO DE ING. QUIMICA, Universidad Nac. de San Juan, Facultad de Ingeniería, ARGENTINA

⁽²⁾ Laboratorio de Sólidos Porosos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA

*mgimenez@unsj.edu.ar

RESUMEN

Varias tecnologías han sido aplicadas y están siendo investigadas con el fin de proponer nuevas alternativas de prevención y remediación de la contaminación con metales pesados. La adsorción es una de las más efectivas. El aprovechamiento de residuos de actividades agrícolas e industriales como precursores de carbones activados son de gran interés debido a su bajo costo, elevada disponibilidad y porque a través de su valorización se aporta a la solución de problemas ambientales [1].

En este trabajo se presentan estudios de remoción de plomo utilizando adsorbentes derivados de desechos de la industria vitivinícola, actividad importante de la Región de Cuyo. Se utiliza escobajo de uva, derivado del proceso de elaboración de vinos y mosto, y lex de uva, proveniente de la obtención de aceite de semillas de uva. Estos materiales fueron carbonizados, briqueteados, activados con vapor de agua y caracterizados mediante análisis próximo y elemental, pH_{pzc}, área superficial específica, distribución de tamaño de poros y grupos ácidos y básicos superficiales. Para evaluar la efectividad de estos materiales como adsorbentes se instrumentaron ensayos cinéticos, en equilibrio y dinámicos.

Se presenta en forma comparativa los resultados de los estudios, observándose que la química superficial de los adsorbentes es un factor determinante, mientras que sus propiedades texturales no se muestran relevantes sobre la remoción bajo las condiciones de este estudio. Se evalúa la efectividad de los carbones para la remoción de plomo, teniendo en cuenta la presencia simultánea de los fenómenos de adsorción y precipitación [2].

Palabras clave: plomo, adsorción, residuos agroindustriales.

Referencias

[1] Foo, K.; Hameed, B. Preparation and character. of activated carbon from sunflower seed oil residue via microwave assisted K₂CO₃ activation, Bioresource Tech., (2011), 9794–9799.

[2] Giraldo, L.; Moreno, J. Pb²⁺ adsorption from aqueous solutions on activated carbons obtained from lignocellulosic residues, Brazilian Journal of Chemical Eng., (2008), 143–151.



EFECTO DE LA PRESENCIA DE UN SURFACTANTE CATIONICO EN LA ADSORCIÓN DEL HERBICIDA PARAQUAT Y DE Cd^{2+} SOBRE LA SUPERFICIE DE MONTMORILLONITA (P-29)

R. Ilari, M. Etcheverry, C. Zenobi, G. Zanini*

INQUISUR (CONICET-UNS), Departamento de Química. Universidad Nacional del Sur (UNS), Bahía Blanca, ARGENTINA

*gzanini@uns.edu.ar

RESUMEN

Plaguicidas, metales pesados y surfactantes cohabitan los mismos medios naturales, su movilidad en el ambiente está íntimamente relacionada con procesos de adsorción-desorción sobre la superficie de minerales constituyentes del suelo. Poco se conoce acerca de cómo influye su presencia simultánea frente a una superficie.

En este trabajo se presenta un estudio de la influencia del surfactante cloruro de bencildimetildodecilamonio (BAC^+) sobre la adsorción del plaguicida paraquat (PQ^{2+} ; dicloruro de 1,1'-dimetil-4,4'-bipiridinio) y de Cd^{2+} sobre montmorillonita.

Debido a la carga estructural negativa presente en la montmorillonita se espera que la interacción predominante entre estas especies catiónicas y la superficie de la arcilla sea electrostática y de esta manera frente a la superficie compitan por los mismos sitios de adsorción.¹

Se realizaron isotermas de adsorción de BAC^+ , PQ^{2+} y Cd^{2+} sobre Na- montmorillonita como también isotermas de adsorción de mezclas PQ^{2+}/ BAC^+ y Cd^{2+}/ BAC^+ . En todos los sistemas estudiados se observó que el surfactante posee mayor afinidad por la superficie de la arcilla. Esto indica que posiblemente otro tipo de factores estén involucrados además de las interacciones electrostáticas.

Para los sistemas PQ^{2+}/ BAC^+ y Cd^{2+}/ BAC^+ se observó que la presencia del surfactante disminuye la adsorción del plaguicida y de Cd^{2+} sobre Na-montmorillonita. En ambos casos los resultados indican una clara competencia del PQ^{2+} y del Cd^{2+} con el surfactante por los sitios de adsorción de la arcilla.

Palabras clave: Adsorción competitiva, plaguicida, metal pesado, surfactante.

Referencias

[1] Sparks, D.L., 2003. *Environmental soil Chemistry*. Ed. Academic Press, Inc. Londres, 352p.



CONVERSIÓN DE CÁSCARAS DE NARANJAS EN CARBÓN ACTIVADO Y SU EMPLEO EN EL TRATAMIENTO DE AGUAS CONTAMINADAS POR COLORANTES (P-30)

M.E. Fernandez⁽¹⁾, G. Nunell⁽¹⁾, P.R. Bonelli⁽¹⁾, A.L. Cukierman^{(1,2)*}

⁽¹⁾PINMATE – Departamento de Industrias, Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, ARGENTINA

⁽²⁾Cátedra de Farmacotecnia II–Tecnología Especial, Departamento de Tecnología Farmacéutica, Universidad de Buenos Aires, Facultad de Farmacia y Bioquímica, ARGENTINA

*analea@di.fcen.uba.ar

RESUMEN

La contaminación de los cursos de agua causada por la producción, uso y disposición de colorantes sintéticos tiene como consecuencia la disminución de la fotosíntesis de plantas acuáticas y del crecimiento de bacterias que participan en la degradación biológica de impurezas [1]. Debido a su eficiencia y facilidad de implementación, los carbones activados se utilizan exitosamente en procesos de adsorción para el tratamiento de efluentes líquidos que contienen tanto contaminantes inorgánicos como orgánicos. El desarrollo de carbones a partir de precursores de carácter renovable y de bajo costo, es un recurso promisorio para lograr cumplir con las regulaciones de vertido de contaminantes, a menores costos operativos. En este trabajo, se aborda la conversión de cáscaras generadas en la industrialización de naranjas en carbón activado, mediante activación química en atmósfera auto-generada, empleando una solución de ácido fosfórico como agente activante y condiciones de operación moderadas. Se determinan las características fisicoquímicas y texturales del carbón desarrollado y se investiga su efectividad en la remoción de un colorante básico representativo (rodamina B) en solución. El carbón activado desarrollado presenta área específica de 1090 m²/g, volumen total de poros de 1.2 cm³/g y 80% de mesoporos. Mediante la aplicación del modelo de Freundlich a la isoterma de adsorción de rodamina B determinada experimentalmente, se obtiene una capacidad máxima de adsorción del colorante de 1.07 mmol/g. Ésta es superior a otros datos informados en la bibliografía [2].

Palabras clave: carbón activado mesoporoso, cáscaras de naranja, rodamina B.

Referencias

- [1] Mezohegyi, G.; van der Zee, F.P.; Font, J., Fortuny; A., Fabregat, A. Towards advanced aqueous dye removal processes: A short review on the versatile role of activated carbon. J. Environ. Manage. 102 (2012), 148-164.
- [2] Gad, H.M.H.; El Sayed, A. A. Activated carbon from agricultural by-products for the removal of Rhodamine-B from aqueous solution. J. Hazard. Mater. 168 (2009) 1070-1081.



EFFECTIVIDAD DE TELAS DE CARBON ACTIVADO DESARROLLADAS POR ACTIVACION QUIMICA DE UN PRECURSOR CELULOSICO EN LA REMOCION DE IONES NITRATOS DEL AGUA (P-31)

M.E. Ramos⁽¹⁾, P.R. Bonelli⁽¹⁾, A.L. Cukierman^{(1,2)*}

⁽¹⁾ PINMATE, Departamento de Industrias, Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Argentina.

⁽²⁾ Cátedra de Farmacotecnia II-Tecnología Especial, Universidad de Buenos Aires, Facultad de Farmacia y Bioquímica, Argentina.

*analea@di.fcen.uba.ar

RESUMEN

La contaminación de las napas subterráneas con iones nitrato, debida principalmente al empleo intensivo de fertilizantes en zonas agrícolas y a la descarga de efluentes industriales líquidos en medioambientes acuáticos, constituye un problema creciente a nivel global. La adsorción de nitratos empleando carbones activados representa una alternativa atractiva para el tratamiento terciario de aguas contaminadas con esta especie, pero su aplicación se ha visto restringida debido a que las muestras comerciales disponibles presentan baja efectividad [1, 2]. En este contexto, se estudió la efectividad de telas de carbón activado (TCA), desarrolladas por activación química de un precursor celulósico con distintos agentes reactivos, en la remoción de nitratos a partir de soluciones diluidas. Para el desarrollo de las TCA, se impregnaron muestras del precursor con soluciones (5 %p/p) de NH₄Cl, AlCl₃, citrato de amonio, H₃PO₄. Las muestras impregnadas se trataron térmicamente bajo flujo de N₂ a 863 °C. A fin de evaluar la efectividad de remoción de las TCA, se realizaron ensayos en modo batch, empleando una solución modelo de NaNO₃ (100 ppm), en condiciones de equilibrio pre-establecidas. Las TCA obtenidas por activación con NH₄Cl presentaron el mayor rendimiento, punto de carga cero y nivel de remoción de nitratos, superior al 80%. La isoterma de adsorción de nitrato determinada experimentalmente para estas TCA se representó satisfactoriamente mediante los modelos de Langmuir y Freundlich.

Palabras clave: Telas de carbón activado, Activación química, Remoción de nitratos.

Referencias

- [1] Oztürk N, Bektas TE.. Nitrate removal from aqueous solution by adsorption onto various materials. J Hazard Mater 2004;112 (1-2):155-62.
- [2] Namasivayam C, Sangeetha D. Recycling of agricultural solid waste, coir pith: Removal of anions, heavy metals, organics and dyes from water by adsorption onto ZnCl₂ activated coir pith carbon. J Hazard Mater 2006;135(1-3):449-52.



ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN DE ARSENIATO SOBRE GIBBSITA POR CÁLCULOS DFT (P-32)

C. Luengo^{(1)*}, R. Ferullo⁽¹⁾, N. Castellani⁽²⁾

⁽¹⁾ INQUISUR, Universidad Nacional del Sur, ARGENTINA

⁽²⁾ Grupo de Materiales y Sistemas Catalíticos, IFISUR, Universidad Nacional Del sur, ARGENTINA

*cluengo@uns.edu.ar

RESUMEN

Uno de los elementos químicos de gran interés en procesos relacionados con la contaminación ambiental es el arsénico. Dicho elemento es eminentemente tóxico y se encuentra en concentraciones bastante elevadas en el agua subterránea de las provincias de Buenos Aires, Córdoba, la Pampa y Santiago del Estero, agua que en muchos casos es utilizada para el consumo humano [1]. La concentración de arseniato en aguas naturales es determinada principalmente por procesos de adsorción-desorción sobre la superficie de minerales, entre los cuales los más importantes son los óxidos. La gibbsita ($Al_2O_3 \cdot 3H_2O$) es un óxido de aluminio con gran área superficial y un importante adsorbente en sistemas de aguas subterráneas y superficiales.

El objetivo de este trabajo es estudiar la adsorción de arseniato sobre gibbsita utilizando el método del funcional de la densidad (DFT, Density Functional Theory) a través del funcional híbrido B3LYP y el empleo de las bases gaussianas 6-31G** (para los átomos involucrados en la adsorción) y 3-21G (para el resto de los átomos). Se optimizaron las geometrías de los aniones arseniato, del cluster de gibbsita $[Al_6(OH)_{18}(H_2O)_6]$ y de los sistemas arseniato-gibbsita. Se optimizaron dos tipos de complejos superficiales a pH ácido y básico: monodentado mononuclear y bidentado binuclear. Se calcularon las energías para cada sistema incluyendo el efecto del solvente.

Los resultados indican que los complejos monodentados tienen mayor tendencia a formarse sobre la superficie de la gibbsita en comparación con los complejos bidentados. Las reacciones de adsorción tanto a pH bajo como alto son todas endotérmicas.

Palabras clave: química cuántica, óxido de aluminio, arsénico, adsorción.

Referencias

[1] Smedley, P. L.; Kinniburgh, D. G. *A review of the source, behaviour and distribution of arsenic in natural waters*, Appl. Geochem., 2002, 17, 517-568.



REMOCION DE IONES NITRATO PRESENTES EN AGUA MEDIANTE CARBON ACTIVADO OBTENIDO A PARTIR DE UN RESIDUO FORESTAL (P-33)

G.V. Nunell⁽¹⁾, M.E. Fernandez⁽¹⁾, P.R. Bonelli⁽¹⁾, A.L. Cukierman^{(1,2)*}

⁽¹⁾ PINMATE, Departamento de Industrias, Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Argentina.

⁽²⁾ Cátedra de Farmacotecnia II–Tecnología Especial, Universidad de Buenos Aires, Facultad de Farmacia y Bioquímica, Argentina.

*analea@di.fcen.uba.ar

RESUMEN

La contaminación de las napas subterráneas por iones nitratos se encuentra ampliamente diseminada en zonas agrícolas, debido al uso de agroquímicos. La toxicidad de este contaminante se debe a que se reduce a nitrito en el organismo y éste actúa como precursor en la formación de compuestos carcinogénicos [1]. La adsorción con carbones activados para la remoción de iones nitrato ha sido poco explorada y las muestras comerciales resultan poco eficientes. En este marco, se examinó la factibilidad de emplear aserrín proveniente de una especie invasora, Parkinsonia aculeata, como precursor para el desarrollo de un carbón activado de efectividad específica en la remoción de iones nitratos presentes en solución acuosa. El carbón activado se desarrolló mediante el proceso de activación química empleando carbonato de potasio como agente activante. Se llevó a cabo la caracterización química y textural del carbón activado obtenido y de una muestra comercial, utilizada como referencia, y se realizaron ensayos batch empleando soluciones acuosas diluidas de NaNO_3 , en condiciones de equilibrio preestablecidas [2], a fin de evaluar la capacidad de remoción de los carbones activados. Se encontró que el carbón activado obtenido a partir del aserrín, a pesar de poseer un área específica inferior ($\sim 780 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$) a la de la muestra comercial ($\sim 1400 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$), presenta, en condiciones de equilibrio, una mayor efectividad en la capacidad de remoción de iones nitratos. Esta resultó consistente con la presencia de funcionalidades básicas en la superficie del carbón activado desarrollado.

Palabras clave: Carbón activado, Iones nitrato, Activación con carbonato de potasio.

Referencias

- [1] Cho, Dong-Wan.; Chon, Chul-Min.; Kim, Yongje.; Jeon, Byong-Hun.; Schwartz, Frank W. Lee, Eung-Seok.; Song, Hocheol. Adsorption of nitrate and Cr(VI) by cationic polymer-modified granular activated carbon. Chemical Engineering Journal, (2011), 298– 305.
- [2] Nunell, G.V.; Fernández, M.E.; Bonelli, P.R.; Cukierman, A.L. Conversion of biomass from an invasive species into activated carbons for removal of nitrate from wastewater, Biomass and Bioenergy, (2012), 87-95.



TRATAMIENTO DE AGUA: ADSORCIÓN DE NITRATOS SOBRE ÓXIDOS MIXTOS (P-34)

A.C. Heredia⁽¹⁾*, M. Oliva^(2,3), L. Acosta⁽¹⁾, Y. Carreño⁽¹⁾, E. Herrero⁽¹⁾, M.E. Crivello⁽¹⁾

⁽¹⁾ Centro de Investigación y Tecnología Química (CITEQ), Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Córdoba, Argentina

⁽²⁾ Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, ARGENTINA

⁽³⁾ IFFAMAF – Conicet, Universidad Nacional de Córdoba, ARGENTINA

*angelicaheredia@gmail.com

RESUMEN

En los últimos años se ha producido un aumento de la contaminación de nitratos en agua debido principalmente a la creciente utilización de fertilizantes y al vertido de efluente sin tratamientos de ciertas industrias [1]. La Organización Mundial de la Salud ha establecido 50 mg/l de NO_3^- como valor máximo admisible en agua potable, valores superiores son perjudiciales para la salud como el desarrollo de metahemoglobinemias en neonatos [2]. Las hidrotalcitas (HT) son una clase de arcilla aniónica cuya fórmula es: $[\text{Mg}_6\text{Al}_2(\text{OH})_{16}]\text{CO}_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, la descomposición térmica a 450 °C genera óxidos mixtos que tienen la propiedad de reconstruir la estructura laminar en medio acuoso recuperando los posibles aniones de la intercapa, esta propiedad se llama efecto memoria y se utiliza para eliminar iones nitratos de medios acuosos. Las HT se sintetizaron por coprecipitación con relación de Mg/Al de 3 y 4, las mismas se calcinaron en atmósfera de aire a 450 °C por 9 hs. El material antes y después de utilizado fue caracterizado por DRX, área superficial y FT-IR. La adsorción de nitrato se lleva a cabo durante 7 horas en un reactor tipo Batch de 100 ml de capacidad agitado magnéticamente a temperatura ambiente, la relación (g catalizador)/(g nitrato) fue 20. Las muestras se toman cada una hora y analizan por UV-Vis. Se observó que los óxidos reconstruyen la estructura laminar incorporando el nitrato en la intercapa disminuyendo la concentración del medio por debajo de los niveles permitidos en 4 hs de reacción.

Palabras clave: Hidrotalcita, Óxidos mixtos, Nitrato

Referencias

- [1] Barrabés, N.; Sá, J. *Catalytic nitrate removal from water, past, present and future perspectives*, Appl Cat B: Env., (2011), 1-5.
- [2] Manassaram, D. M.; Backer, L. C.; Moll, D. M.; *A review of nitrates in drinking water: Maternal exposure and adverse reproductive and developmental outcomes Environ, Health Persp.*, (2006), 320-327.



ESTUDIO COMPARATIVO DE LA ADSORCIÓN DE TOLUENO EN AgMOR Y AgAl-MCM41 MEDIANTE FTIR (P-35)

S.G. Aspromonte*, R.M. Serra, E.E. Miró, A.V. Boix

(1) INCAPE, Universidad Nacional del Litoral, Facultad de Ingeniería Química, ARGENTINA

*saspromonte@fiq.unl.edu.ar

RESUMEN

En este trabajo se evaluó la capacidad de adsorción y retención de adsorbentes basados en Na-mordenita y Al-MCM41 modificado con Ag para su aplicación como trampa de hidrocarburos en efluentes de combustión. Mediante FTIR se analizó la interacción entre las especies de los centros activos y la molécula de tolueno adsorbido. Se determinó una fuerte interacción entre el tolueno y los iones Ag^+ presentes en los sólidos AgNa-MOR y se observaron grupos C=O producto de la descomposición del C_7H_8 a elevadas temperaturas [1]. Sin embargo, en la muestra AgAl-MCM41 se detectaron las bandas características del tolueno en interacción con los grupos silanoles, característicos del material mesoporoso [2].

A través de técnicas como, XPS, TPR y UV-Vis DRS, se determinó la presencia de iones Ag^+ ubicados en posiciones de intercambio dentro de la estructura NaMOR, junto a especies Ag_2O . En los sólidos AgAl-MCM41, se identificaron especies correspondientes a partículas de Ag_2O y cationes Ag^+ en interacción con la estructura, junto a una pequeña fracción de Ag^0 .

Además, se correlacionó la capacidad de adsorción, la temperatura y el coeficiente de retención, a través de las curvas de quiebre durante la adsorción de C_7H_8 y cuantificando la desorción a temperatura programada.

Se determinó que el proceso de adsorción/desorción depende de varios factores: carácter ácido-base del material; reactividad de los centros activos y ubicación de los iones Ag^+ .

Palabras clave: Trampa de hidrocarburos, soportes microporosos, materiales mesoporosos, plata.

Referencias

- [1] Hadjiivanov, K. I. *Identification of Neutral and Charged $NxOy$ Surface Species by IR Spectroscopy*, Catal. Rev. Sci. Eng., (2000), 71-144.
- [2] Chen, C. Y.; Burkett, S. L.; Li, H. X.; Davis, M. E. *Studies on mesoporous materials II. Synthesis mechanism of MCM-41*, Microp. Mater., (1993) 27-34.



RETENCIÓN DE IONES METÁLICOS Ni (II) Y Cd (II) POR SÓLIDOS POROSOS OBTENIDOS A PARTIR DE RESIDUOS INDUSTRIALES (P-36)

M.R. Gonzalez^{(1)*}, P. Rodríguez-Estupiñán⁽³⁾, L. Giraldo⁽³⁾, A.M. Pereyra^(1,2), J.C. Moreno-Piraján⁽⁴⁾, E.I. Basaldella^(1,2)

⁽¹⁾ Centro de Investigaciones y Desarrollo de Ciencias Aplicadas (CINDECA). Universidad Nacional de La Plata, La Plata-Argentina.

⁽²⁾ Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencia y Tecnología de Materiales (CITEMA). Universidad Tecnológica Nacional, La Plata-Argentina.

⁽³⁾ Grupo de Calorimetría, Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Bogotá-Colombia.

⁽⁴⁾ Departamento Química. Facultad de Ciencias. Universidad de los Andes. , Departamento de Química, Bogotá-Colombia.

*maxi_gonzalez@quimica.unlp.edu.ar

RESUMEN

Los procesos de adsorción e intercambio iónico sobre sólidos porosos son métodos de aplicación actual en la eliminación de iones de metales tóxicos contaminantes de fases acuosas. En este trabajo se obtuvo un material zeolítico a partir de un catalizador de cracking agotado siguiendo el procedimiento descrito en [1] y se estudió su comportamiento en la remoción de iones Cd (II) y Ni (II) desde solución acuosa, comparando su efectividad con la de un carbón activado obtenido a partir de cáscara de coco oxidado con HNO₃ [2]. Se determinaron las capacidades de retención (Q) para distintas concentraciones de los cationes en solución. Para [Cd(II)] = [Ni(II)] = 42 ppm, los dos sólidos estudiados realizaron una remoción completa, a valores no detectables por absorción atómica. En el caso de la concentración más alta (135 ppm) se lograron valores de Q muy cercanos en el orden de 40 mg/g siendo para ambos cationes $Q_z > Q_c$. Se identificó el mecanismo de difusión mediante el modelo de difusión intrapartícula y se observó que los datos cinéticos experimentales correlacionan con el modelo de pseudo segundo orden.

Palabras clave: Contaminación acuosa, adsorción, intercambio catiónico, sólidos porosos.

Referencias

- [1] Basaldella, E.; Torres, R.; Conconi, M. *Conversion of exhausted fluid cracking catalysts into zeolites by alkaline fusion*, Applied Clay Science. 42 (2009) 611–614.
- [2] Rodríguez-Estupiñán P, Moreno-Pirajan JC, Giraldo L. *Ni(II) adsorption on activated carbon. Relationship between physicochemical properties and adsorption capacity*. Ads. Sci. & Tech. 2011; 29: 541 – 52.

CARACTERÍSTICAS SUPERFICIALES DE CARBONES ACTIVADOS: CORRELACIÓN CON LA ADSORCIÓN EN SOLUCIONES ACUOSAS (P-37)

P.D. Húmpola^{(1)*}, H.S. Odetti⁽¹⁾, F.A. Sattler⁽¹⁾, A.E. Fertitta⁽²⁾, J.L. Vicente⁽²⁾

⁽¹⁾ Departamento de Química General e Inorgánica. FCB. UNL. Santa Fe. Argentina.

⁽²⁾ INIFTA.-UNLP – CIC – CONICET. La Plata, Argentina.

*p_humpola@hotmail.com

RESUMEN

El presente trabajo tiene como objetivo estudiar carbones activados (CA) empleados en la adsorción de derivados fenólicos en soluciones acuosas, a través del comportamiento experimental de las isotermas de adsorción en solución, para luego correlacionarlos con algunas características superficiales. Se utilizaron dos carbones activados en polvo: Tetrahedron y Norit. Para la caracterización superficial se emplearon las isotermas de adsorción-desorción de N_2 a 77.4 K y CO_2 a 273.2 K y titulación selectiva de Boehm para evaluar la química superficial [1]. Se empleó el modelo de BET para el cálculo de las superficies específicas y Dubinin-Astakhov (DA) con $p/p_0 \leq 0.01$, para el análisis de la región microporosa [2]. Las isotermas en solución se determinaron a 293, 303 y 313 K y se aplicaron para su análisis los modelos de Freundlich y Sips.

Parámetros DA en el rango de bajas presiones de N_2 a 77.4 K

	Volumen de microporo [mL.g ⁻¹]	Energía Característica [kJ.mol ⁻¹]	Parámetro de Heterogeneidad
TETRAHEDRON	140	23.8	3.0
NORIT	204	21.8	1.9

Si bien la adsorción de fenol no se limita a los microporos, a bajas concentraciones se adsorbe inicialmente en estos sitios, que son más energéticos. Los microporos de mayor volumen, más anchos y con mayor heterogeneidad, encontrados en el CA Norit (ver tabla), influyen en la primera región de la isoterma en solución, siendo mayor la adsorción; pero en la región de mayor concentración de equilibrio este comportamiento se invierte y la superficie BET del Norit (680.23 m²/g) disminuye. Esto podría deberse a la presencia de grupos químicos (carboxilos) en el CA Norit, que facilitan la entrada del solvente, bloqueando de esta forma la adsorción de fenol.

Palabras clave: carbón activado, fenol, microporos, química superficial.

Referencias

- [1] Salame, I.I. and Bandosz, T.J. *Role of surface chemistry in adsorption of phenol on activated carbons J. Colloid Interface Sci.* (2003), 307–12.
- [2] Terzyk, A.P. *Further insights into the role of carbon surface functionalities in the mechanism of phenol adsorption J. Colloid Interface Sci* (2003), 301–29.



NANOFIBRAS DE CARBÓN A PARTIR DE RESIDUOS DE LA INDUSTRIA DEL CUERO PARA ADSORCIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS EN AGUA (P-38)

L.C. Oliveira^{(1)*}, A.C. Silva⁽¹⁾, J.V. Coelho⁽¹⁾, A.R. Teixeira⁽¹⁾, M.C. Pereira⁽²⁾

⁽¹⁾ Departamento de Química, ICEx, Universidad Federal de Minas Gerais, Brasil.

⁽²⁾ Instituto de Ciência, Engenharia e Tecnologia, Universidad Federal de los Valles del Jequitinhonha e Mucuri, Brasil.

*luizoliveira@qui.ufmg.br

RESUMEN

Hemos preparado nanofibras de carbono (CNF) a partir de residuos de la industria de cuero con cromo. El procesamiento de reducción adecuado produce un material de carbono con nanopartículas soportadas de cromo. Datos de difracción de rayos-X mostró que el Cr₂O₃ se reduce en la superficie de carbono para producir CrC y Cr metálico, que es el catalizador eficaz para el crecimiento CNFs. Las matrices de CNF fueron confirmados por las imágenes de TEM. Datos de Raman reveló que los CNFs sintetizados tienen una estructura de grafito de baja calidad que favorece su uso en procesos de adsorción. Estos CNFs presenta una mayor afinidad a los colorantes aniónicos, mientras que los colorantes catiónicos están mejor adsorbido sobre el sustrato de carbono. El bajo costo y la disponibilidad del precursor de carbono hace que su uso potencial para producir CNFs de interés [1].

Palabras clave: Nanofibras de carbono, cromo, adsorción

Referencias

[1] Oliveira, Luiz; Coura, Camila; Guimaraes, Iara; Goncalves, Maraisa. *Removal of organic dyes using Cr-containing activated carbon prepared from leather waste*, Journal of Hazardous Materials, (2011), 1094 – 1099.

PARÁMETROS DE SORCIÓN DEL MODELO DE BET PARA EL PETRÓLEO EN SORBENTES ORGÁNICOS Y MINERALES (P-39)

O. Katusich⁽¹⁾*, S.M. Ríos⁽¹⁾, N. Nudelman⁽²⁾

⁽¹⁾ Departamento de Química, Universidad Nacional de la Patagonia, Facultad de Ciencias Naturales, ARGENTINA

⁽²⁾ Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional de Buenos Aires, San Luis, ARGENTINA

*katusich@unpata.edu.ar

RESUMEN

A los efectos de predecir el comportamiento de distintos tipos de sorbentes ante las situaciones de derrame de petróleos en suelos, en el presente trabajo se determinaron sus isotermas de sorción. Los sorbentes ensayados fueron: un producto comercial que contiene fibras de celulosa (ORG), una mezcla comercial de minerales (MEZ); dos algas, *Codium fragile* (COD) y *Lessonia vadosa* (LES); arcilla del tipo smectita (ESM) y una mezcla arcilla-arena al 50%. Figura 1. Se realizaron ensayos en batch y las concentraciones remanentes se determinaron por espectrofotometría UV-visible, según métodos informados en bibliografía [1]. Los datos obtenidos se representaron con el modelo multicapa de BET ya que permitió el mejor ajuste de la información experimental [2]. Los parámetros del modelo son: K_1 relacionada con el calor de sorción de la primer monocapa y K_2 que representa la masa de sorbato sorbida en ella. El alga LES tiene el mayor valor de K_1 ($0,603 \text{ L mg}^{-1}$) y ESM el mayor valor de K_2 , (833 mg kg^{-1}). Si se comparan los K_2 de los sorbentes minerales con los de sorbentes orgánicos puede observarse que los primeros son capaces de sorber mayor masa de petróleo que los segundos a pesar de que los calores de sorción, representados por K_1 son inferiores.

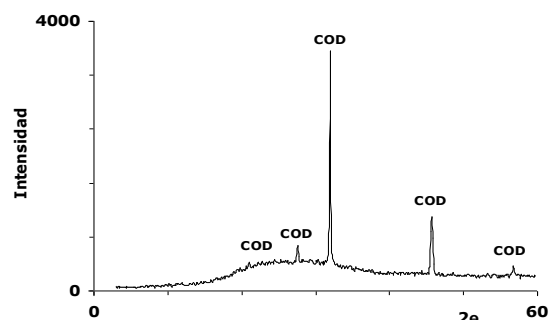


Figura 1. Diffractograma de COD

Palabras clave: Sorción, Petróleo, Algas

Referencias

[1] Nudelman, N.; Ríos, S. M.; Katusich, O. *Application of some physical organic chemistry models to the study of oil spills residues in Patagonian soils*, Journal of Physical Organic Chemistry, (2008), 329-337.

[2] Katusich, O. Tesis Doctoral. UNPSJB-FCN, (2011).



EVALUACION DE MATERIALES MESO Y NANOPOROSOS DE ALTA SUPERFICIE ESPECIFICA PARA TRATAMIENTO DE EFLUENTES ACUOSOS (P-40)

B. Lombardi, A.N. Scian

Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica, CIC-CONICET,
Cno. Centenario y 506 (1897)- Gonnet, ARGENTINA.

*lombardib@cetmic.unlp.edu.ar

RESUMEN

En el presente trabajo se evaluán dos materiales como adsorbentes, uno de ellos es natural, un mineral arcilloso, y el otro sintético, de base carbonosa.

Los minerales arcillosos, en particular las bentonitas, presentan alta superficie específica y propiedades de intercambio iónico, estas características hacen que tengan aplicaciones industriales en filtración, adsorción, clarificación, decoloración y otros.

Los materiales meso y nanoporosos de base carbonosa, poseen un gran potencial tecnológico desde el punto de vista de su capacidad de adsorción y retención de sustancias en estado fluido, dado la elevada superficie específica que desarrollan. Esto justifica su utilización como adsorbente de sustancias orgánicas que posean instauraciones y/o grupos aromáticos, y otras con alta densidad electrónica sería incuestionable. La bentonita utilizada proviene de la Norpatagonia Argentina, con 96% de montmorillonita y cuyas propiedades principales son CIC=105 (meq/100g), superficie específica por adsorción de sustancias polares = 815 (m²/g) [1].

El sistema C (carbono), obtenido a partir de una mezcla precursora sol-gel, la cual es gelificada, secada, curada, y calcinada en atmósfera reductora durante 3 hs. a 1500 °C generadora del sistema SiO₂-C. Este material compuesto consistente en una red de sílice amorfa entrecruzada con otra red de carbono amorfo pseudografítico, ambas independientes una de otra, fue atacado con HF 20% eliminando la red de sílice y dejando solo la carbonosa (C) con una superficie específica BET = 1144 (m²/g)[2]. Ambos materiales se utilizaron y compararon como adsorbentes de 5 productos agroquímicos diferentes que actualmente se usan en la actividad económico-productiva. Se evaluó la capacidad de adsorción reproduciendo las condiciones de uso y vertido a los cursos de agua.

Palabras clave: efluentes, retención, adsorción.

Referencias

[1] Lombardi, B., Baschini, M. y Torres Sánchez, R. Characterization of montmorillonite from North Patagonia deposits (Argentina): physicochemical and structural parameters correlation. J. Arg. Chemical Soc.,90, 2000, 87-99.

[2] Lombardi, B., y Scian, A. Materiales meso y nanoporosos de alta superficie específica del sistema SiO₂-C obtenidos a distintas temperaturas. Evaluación textural y desarrollo de superficie. Congreso Sam-Conamet, 2009.

ADSORCIÓN Y CONCENTRACION DE Cu^{2+} MEDIANTE SBA-15 FUNCIONALIZADA CON APTES, UN MATERIAL REUTILIZABLE (P-41)

M.V. Lombardo^{(1)*}, M. Videla⁽²⁾, G.J.A.A. Soler-Illia⁽¹⁾

⁽¹⁾ Gerencia Química, Centro Atómico Constituyentes, CNEA, ARGENTINA

⁽²⁾ Rhein Chemie Argentina S.A, ARGENTINA

*vlombardo@conicet.gov.ar

RESUMEN

Los materiales mesoporosos híbridos (MMH) son útiles para censado y recuperación de iones metálicos presentes en aguas residuales^[1]. Algunos de los aspectos que están relacionados con el desempeño de MMH como adsorbentes son, la accesibilidad de los poros, la estabilidad de las funciones orgánicas y la reutilización de los mismos. El conocimiento de estos aspectos es crítico en el diseño de protocolos de adsorción-desorción.

En este trabajo se sintetizó sílice mesoporosa SBA-15, mediante precipitación en medio ácido. Luego se funcionalizó la superficie, por post-grafting, con aminopropiltriétoxosilano (APTES) en diferentes solventes y temperaturas. Con estos MMH se adsorbió Cu^{2+} a partir de soluciones de CuSO_4 (7-300 ppm). Luego se desorbió en medio ácido (HCl 0.1M), incluso contra gradiente de Cu^{2+} , concentrado el Cu^{2+} hasta 10 veces. Se regeneraron en medio básico y se probaron sucesivas adsorciones de Cu^{2+} .

Se realizaron estudios estructurales para ver cómo se afecta el material con los usos repetidos y de qué manera se puede optimizar la vida útil como adsorbente.

Los MMH son eficientes adsorbentes (1,15-1,75 mmol $\text{Cu}^{2+}\text{g}^{-1}$), aun cuando una fracción de los grupos orgánicos se pierde durante el proceso de adsorción y la matriz es modificada durante este proceso^[2]. Un estudio comparativo entre XPS y análisis elemental, demuestra que el contenido de grupos amino es mayor en la superficie, dando lugar a diferentes comportamientos en la complejación del Cu^{2+} .

Palabras clave: material mesoporosos híbrido, función aminopropilo, adsorción de Cu^{2+}

Referencias

- [1] A. Walcarius, L. Mercier, *Mesoporous organosilica adsorbents: nanoengineered materials for removal of organic and inorganic pollutants*, J. Mater. Chem. (2010) 4478–4511
- [2] M.V. Lombardo, M. Videla, A. Calvo, F.G. Requejo, G.J.A.A. Soler-Illia. *Aminopropyl-modified mesoporous silica SBA-15 as recovery agents of Cu(II)-sulfate solutions: Adsorption efficiency, functional stability and reusability aspects*. J. Hazard. Mater. (2012) 53– 62.



AGUA EN NANOPOROS DE TiO₂: ESTRUCTURA, DINAMICA Y COMPORTAMIENTO DE FASE DE AGUA NANOCONFINADA (P-42)

E. González Solveyra ^{(1)*}, *E. De la Llave*, ⁽¹⁾ *G. Soler Illia*, ⁽²⁾ *V. Molinero*, ⁽³⁾ *D. Scherlis* ⁽¹⁾

⁽¹⁾ Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pab. II, C.A.B.A. C1428EHA, Argentina.

⁽²⁾ Gerencia Química, Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, Argentina

⁽³⁾ Department of Chemistry, University of Utah, EE.UU.

*esolveyra@qi.fcen.uba.ar

RESUMEN

El efecto de las interfases y el confinamiento sobre el comportamiento del agua es de alta relevancia teórica y tecnológica. Sin embargo, son escasos a la fecha trabajos que estudien las propiedades de agua confinada en poros cilíndricos, donde entran en juego confinamiento, curvatura, cristalinidad de la superficie e interacciones con la misma.

Empleando herramientas de dinámica molecular clásica se estudio la estructura, dinámica y comportamiento de fases de agua confinada en canales cilíndricos de TiO₂ cristalino de 1.3, 2.8 y 5.1 nm de diámetro con distinto contenido de agua, empleando el campo de fuerzas derivado por Bandura y colaboradores.^[1]

En todos los sistemas estudiados se observó la formación de una bicapa fuertemente adsorbida cuya movilidad se encuentra sensiblemente reducida respecto al agua bulk. La movilidad traslacional del agua depende fuertemente de la distancia a la superficie de los poros así como también la estructura y dinámica de la red de puentes hidrógeno. Para el sistema más pequeño, el llenado del poro procede sin la formación de una fase líquida dentro del poro. Por otro lado, para los sistemas de 2.8 y 5.1 nm de diámetro se observó la aparición de una fase condensada con $\rho \sim \rho_{bulk}$ en co-existencia con una fase adsorbida de baja densidad a partir de llenados críticos muy superiores a los observados para sistemas menos hidrofílicos, tales como sílica. La ausencia de la misma en el poro más pequeño se supone una consecuencia de la baja movilidad de la bicapa, que dificulta la nucleación necesaria para la condensación capilar.

Palabras clave: titania, agua, estructura, fases, dinamica

Referencias

[1] Bandura AV, Kubicki JD., *J Phys Chem B*. 2003.;107(40):11072–81.

POLIANFOLITOS DERIVADOS DE HETEROCICLOS COMO ADSORBENTES DE COMPUESTOS IÓNICOS: ESTUDIOS CINÉTICOS Y DEL EQUILIBRIO (P-43)

L.V. Lombardo Lupano⁽¹⁾, J.M. Lázaro Martínez^(1,2), G.J. Copello^(1,2), L.A. Del Rio⁽²⁾, P.Y. González Clar⁽²⁾, G. Levin^(1,2), M.V. Miranda^(1,2), V. Campodall' Orto^(1,2) *

⁽¹⁾ CONICET, ARGENTINA.

⁽²⁾ Universidad de Buenos Aires, Facultad de Farmacia y Bioquímica, ARGENTINA.

*vcdall@ffyb.uba.ar

RESUMEN

Se han obtenido polímeros insolubles derivados de ácido metacrílico (MAA), etilenglicol diglicidil éter (EGDE) y 2-metilimidazol (2MI) mediante un procedimiento novedoso de un solo paso. Estos materiales son polianfolitos, debido a la presencia de grupos ácidos, básicos y un cierto número variable de cargas positivas permanentes.



Las partículas adsorben sobre su superficie diferentes cationes con una notable capacidad máxima de carga (B_{max}). Han sido probados en la remoción de iones Co(II), Pb(II) y Cd(II), con B_{max} de 0.5 , 1.0 y 1.6 mmol g⁻¹, respectivamente, a temperatura ambiente. Los estudios cinéticos demostraron una captación superior al 90% en los primeros 60 minutos de contacto. Los mecanismos más probables son intercambio iónico y/o coordinación.

Para los aniones se observó predominantemente interacción electrostática entre grupos negativos del adsorbato y sitios positivos fijos en la matriz polimérica. Se evaluó la aplicabilidad del polímero en la captura y liberación de fármacos y metabolitos sustituidos con grupos ácidos tales como diclofenac o ácido cólico, con B_{max} de 0.15 y 0.10 mmol g⁻¹, respectivamente.

Se obtuvo un reactor enzimático adsorbiendo la enzima peroxidasa de cáscara de semilla de soja en su forma aniónica sobre el polianfolito a partir del extracto crudo, sin necesidad de purificación previa. La adsorción de un colorante aniónico azo denominado Direct Blue 273 sobre el polianfolito con una B_{max} de 0.44 mmol g⁻¹ es considerada una alternativa viable para la decoloración de efluentes industriales.

Palabras clave: Polianfolitos, Quimiosorción.

ESTUDIOS PRELIMINARES DE ADSORCIÓN DE ANTIBIÓTICOS SOBRE ARCILLAS PILAREADAS (P-44)

M.E. Roca Jalil⁽¹⁾*, M. Baschini⁽¹⁾, K. Sapag⁽²⁾

⁽¹⁾ Grupo de Estudios en Materiales Adsorbentes, IDEPA-CONICET, Universidad Nacional del Comahue, ARGENTINA.

⁽²⁾ Laboratorio de Sólidos Porosos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA.

*merocajalil@gmail.com

RESUMEN

En la última década gran cantidad de estudios científicos han evidenciado la preocupación emergente generada por la presencia de diferentes fármacos en el ambiente, principalmente en aguas y suelos, que se encuentra asociada a su amplia utilización tanto en el área agropecuaria como en la salud humana. Una posible forma de retirarlos del medio que contaminan es mediante la adsorción en materiales adecuados, dentro de los cuales pueden considerarse las arcillas pilareadas (PILC). Las PILC son materiales sintetizados a partir de arcillas naturales que poseen una estructura micro-mesoporosa y presentan propiedades texturales, de estabilidad e hidrofobicidad, que las hacen más interesantes que la arcilla natural para su utilización como adsorbente. Estudios previos han mostrado que las PILC son buenos adsorbentes de moléculas orgánicas con el aliciente que son fácilmente separadas del medio de adsorción [1].

En este trabajo, se presentan arcillas pilareadas con silicio (Si-PILC), sintetizadas según la metodología propuesta por Han et. al [2], las que son evaluadas en medios acuosos y a diferentes pH en la remoción de dos antibióticos de amplio espectro como son la tetraciclina (TC) y la ciprofloxacina (CPX). Los resultados evidencian que las Si-PILC presentan mayor adsorción para la CPX que para la TC, lo que podría estar relacionado con el tamaño molecular y las propiedades texturales del material. La mayor adsorción de CPX se obtuvo a pH 10 lo que podría estar relacionado a la interacción de los centros ácidos de Lewis asociados a los pilares del material con la molécula del antibiótico en su forma aniónica.

Palabras clave: Adsorción en solución, antibióticos, arcillas pilareadas de silicio.

Referencias

- [1] Roca Jalil, M.E.; Vieira, R.; Azevedo, D.; Baschini, M.; Sapag, K. *Improvement in the adsorption of thiabendazole by using aluminum pillared clays*, Applied Clay Science, (2013), 56-63.
- [2] Han, Y.S.; Matsumoto, H.; Yamanaka, S. *Preparation of New Silica Sol-based Pillared clays with high surface area and high thermal stability*, Chemistry of Materials, (1997), 2013-2018.



ADSORCIÓN DE MEZCLAS CON INTERACCIONES NO-ADITIVAS: SIMULACIÓN Y APROXIMACIONES TEÓRICAS (P-45)

O.A. Pinto^{(1)*}, P.M. Pasinetti⁽²⁾, A. Ramirez-Pastor⁽²⁾, F. Nieto⁽²⁾

⁽¹⁾ LASNE, CITSE-CONICET, UNSE, FayA, Argentina

⁽²⁾ INFAP-CONICET, UNSL, FCFMyN, Argentina

*oapinto@unsl.edu.ar

RESUMEN

En el presente trabajo, la termodinámica de adsorción de mezclas binarias ha sido estudiada por medio de simulaciones de Monte Carlo en la asamblea gran canónica en el marco de un modelo de gas de red. El proceso ha sido monitoreado a través de las isothermas totales y parciales y de los calores diferenciales de adsorción correspondientes a ambas especies. Energías de interacción laterales no-aditivas han sido consideradas, donde la energía de enlace entre un átomo y cualquiera de sus primeros vecinos depende fuertemente del estado de ocupación en la vecindad de dicho átomo. Un interesante comportamiento ha sido observado y analizado en términos de las fases ordenadas a baja temperatura que se forman en el sistema. Finalmente, se desarrollaron para el sistema aproximaciones teóricas de Bragg-Williams y cuasiqímica, cuyos resultados fueron contrastados con los correspondientes a la simulación.

Palabras clave: Adsorción, Simulaciones de Monte Carlo, Mezclas Binarias, Aproximación cuasiqímica.



ADSORCIÓN DE IMAZALIL COMERCIAL EN MONTMORILLONITA Y OCTADECILTRIMETILAMONIO-MONTMORILLONITA (P-46)

M. Gamba*, F.M. Flores, R.M. Torres Sánchez

CETMIC, Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica, CIC-CONICET La Plata, Gonnet, Argentina.

*martina.gamba@cetmic.unlp.edu.ar

RESUMEN

En Argentina existe una importante producción de cítricos, que representa aproximadamente el 44% de exportaciones frutícolas del país (1). Previo a su empaque, los frutos son sometidos a un tratamiento postcosecha mediante el agregado de fungicidas comerciales, siendo uno de los más utilizado es el Xedrel 50®, cuyo principio activo es imazalil (2).

Los cationes inorgánicos presentes en las montmorillonitas (MMT) se pueden intercambiar con cationes de surfactantes orgánicos, generando las llamadas organo-montmorillonitas, que a diferencia de las MMT naturales son hidrofóbicas y por lo tanto presentan mayor afinidad por compuestos orgánicos no polares (3).

El objetivo del presente trabajo fue comparar la adsorción del imazalil, en Xedrel 50®, en la MMT y en octadeciltrimetilamonio-montmorillonita intercambiada al 50, 100 y 200% de la capacidad de intercambio catiónico de la MMT (OMMT 0,5; 1 y 2 respectivamente) y analizar los cambios en el espaciado interlamilar, la carga superficial y el comportamiento térmico de los materiales de los sistemas obtenidos.

Se observó que la adsorción de Imazalil en la OMMT 0,5 y 1 es mayor que en la MMT y ésta a su vez es mayor que en la OMMT 2. Los DRX mostraron un aumento del espaciado interlamilar a medida que aumenta la concentración del imazalil en los diferentes adsorbentes, indicando que el fungicida se ubica en la intercapa. La carga eléctrica superficial, con la adsorción del imazalil, disminuye su valor negativo en la MMT, y el valor positivo en la OMMT 1 y 2, independientemente de la concentración del mismo. En el caso de la OMMT 0,5 la adsorción del fungicida genera un cambio del signo de la carga de negativo a positivo a pH ácidos.

Palabras clave: Montmorillonita, Imazalil, Octadeciltrimetilamonio.

Referencias

[1] Documento Base del Programa Nacional: Frutales. Instituto nacional de tecnología Agropecuaria, (2011).

[2] Fouz, B.; Serra, M.; Mateos, M. *Medioambiente y poscosecha*, Horticultura, (2000) 145, 48-51.

[3] Baglieri, A.; Borzì, D.; Abbate, C.; Négre, M.; Gennari, M. *Removal of fenhexamid and pyrimethanil from aqueous solutions by clays and organoclays*. J. Environ. Sci. and Health. Part B, (2009) 220-225.



EL COEFICIENTE DE STICKING EN UN GAS DE RED BIDIMENSIONAL CALCULADO POR DOS MÉTODOS DIFERENTES (P-47)

V.J. Huespe, W. Masy, S.J. Manzi*

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

*sergiojmanzi@gmail.com

RESUMEN

El desarrollo de métodos experimentales, tales como la microscopía iónica de campo o de efecto túnel, posibilita monitorear las reacciones químicas en las superficies de los catalizadores metálicos en tiempo real con aproximación atómica. Como consecuencia de esto, la conducta de las partículas en la superficie, prácticamente comienza a observarse directamente. La teoría de la cinética de adsorción-desorción sobre superficies homogéneas está bien entendida [1-7]. Uno de los métodos usados en el análisis del problema es el Modelo de Gas de Red Cinético (KLG) aplicado a la capa adsorbida. Este método se realizó en analogía al modelo de Ising dependiente del tiempo para sistemas magnéticos, introducido originalmente por R.J.Glauber [8]. Ambos métodos se basan en la aproximación de la ecuación maestra. Existen diferentes modelos dinámicos aplicados al modelo de gas de red cinético, pero pocos han estudiado los diferentes observables dinámicos. A continuación se presenta el coeficiente de sticking para 2 dimensiones para un gas de monómeros con interacciones laterales a primeros vecinos, se incluyen dinámicas clasificadas en blandas, aquellas en las que las probabilidades de transición se pueden factorizar en dos términos, una función de la energía de interacción lateral y dinámicas duras, con las cuales tal factorización no es posible. Los resultados marcan la fuerte relación entre el observable y la dinámica elegida y los mismos se comparan con el Método de Monte Carlo y el de Matriz de Transferencia.

Palabras clave: Coeficiente de Sticking, Dinámicas Blandas y Duras, Monte Carlo, Matrices de Transferencia.

Referencias

- [1] H.J. Kreuzer y Z.W. Gortel, Physisorption Kinetics, Springer-Verlag, Berlín, 1986.
- [2] H.J. Kreuzer y S.H. Payne, en Equilibria and Dynamics of Gas Adsorption on Heterogeneous Solid Surfaces Science and Catalysis, eds. W. Rudzinski, W.A. Steele y G. Zgrablich, Vol. 104, 1997, p. 153.
- [3] S.J. Lombardo y A.T. Bell, Surf. Sci. Reports, 13 (1991) 1.
- [4] S.H. Payne, H.J. Kreuzer, M.Kinne, R.Denecke, H-P-Steinrueck, Surf.Sci(2002). 513,174.
- [5] S.J. Lombardo y A.T. Bell, Surf. Sci. Reports, 13 (1991) 1.
- [6] S.H. Payne, A. Wierzbicki y H.J. Kreuzer, Surf. Sci., 209 (1993) 242.
- [7] G. Costanza, S. Manzi y V. Pereyra, Surf. Sci. 524 (2003), 89
- [8] K. Kawasaki, in Phase Transitions and Critical Phenomena ed. C. Domb y M. S. Green, Academic Press, New York, Vol.2, 1972, p. 443.



ESTADÍSTICA FRACCIONARIA APLICADA AL ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN DE BSA SOBRE RESINAS INTERCAMBIADORAS (P-48)

A. Takara ⁽¹⁾, D. Díaz ⁽¹⁾, P.M. Centres ⁽²⁾, E. Quiroga ^{(1)*}, N.A. Ochoa ⁽¹⁾,
J. Marchese ⁽¹⁾

⁽¹⁾ Laboratorio de Membranas y Biomateriales, INFAP, UNSL-CONICET, San Luis, ARGENTINA.

⁽²⁾ Departamento de Física, INFAP, UNSL-CONICET, San Luis, ARGENTINA

*equiroga@unsl.edu.ar

RESUMEN

Un nuevo modelo teórico (*Fractional Statistical Theory of Adsorption (FSTA)* [1, 2]) fue aplicado para describir el proceso de adsorción de albúmina sérica bovina (BSA) adsorbida sobre resinas intercambiadoras (Amberlite IR-120 y 15 (resinas intercambiadoras catiónicas fuertes) y Amberlite CG-400 (resina intercambiadora aniónica fuerte)). El proceso de adsorción fue estudiado variando el pH y la concentración de BSA: cada resina (0,2 mg/mL) fue contactada con diferentes concentraciones de BSA (0,2-2 mg/mL) a diferentes pHs (2,5-9) durante 2h a $T= 37^{\circ} C$. Entre las resinas intercambiadoras catiónicas, la máxima cantidad de BSA adsorbida en el equilibrio (Q_e) fue obtenida a pH 4,2, siendo la Amberlite IR-120 la que mostró un mayor Q_e (30mg/g). En cambio utilizando la resina intercambiadora aniónica, el mayor Q_e (28mg/g) fue obtenido a pH 9. Los datos experimentales fueron ajustados usando la isoterma de Langmuir-Freundlich (LF) y aplicando la teoría FSTA. Esta última permitió obtener ajustes más robustos que la teoría de LF y valores del cubrimiento de la monocapa más ajustados a lo observado experimentalmente, representados en el parámetro Q_{max} o cubrimiento máximo. Los parámetros de LF son parámetros empíricos, mientras que los parámetros de ajuste de FSTA brindan información sobre la energía de adsorción (parámetro K_e) y la configuración espacial de la molécula adsorbida (parámetro g).

Palabras clave: Adsorción de proteínas, isoterma FSTA, isoterma de Langmuir-Freundlich

Referencias

- [1] Riccardo J.L.; Romá F.; Ramirez-Pastor A.J. *Fractional Statistical Theory of Adsorption of Polyatomics*, Physical Review Letter, 93 (2004) 186101-186105.
- [2] Quiroga E; Centres P.M.; Ochoa N.A.; Ramirez-Pastor A.J. *Fractional statistical theory of adsorption applied to protein adsorption*, Journal of Colloid and Interface Science, 390 (2013), 183-188.



MOLECULAR SIMULATION STUDY OF PROTONATED DYE ADSORPTION (P-49)

B.M. Braga⁽¹⁾, S.M.P. Lucena^{(1)*}

⁽¹⁾ Laboratório de Modelagem e Visualização 3D, GPSA-DEQ, Universidade Federal do Ceará, BRASIL

*lucena@ufc.br

ABSTRACT

Hydrotalcite like compounds are anionic clays of scientific and technological interest due to its use as ion-exchange materials⁽¹⁾, catalysts⁽²⁾, antacids⁽³⁾ and modified electrodes⁽⁴⁾. For those applications a study of the material surface properties is required. Although conventional analytical methods have provided considerable insight of the behavior of layered clays in solution, an atomic level evaluation of the dynamic of its ionic interaction is lacking. Molecular computer simulations have become extremely helpful in providing this perspective. Thus, the goal of this study is to evaluate, using molecular simulation techniques, the adsorption of 5-benzoyl-4-hydroxy-2-methoxybenzenesulfonic acid (MBSA), an anionic dye reference model, concerning its surface positioning and protonation. For this purpose, Monte Carlo simulation in the canonical ensemble were performed with MBSA¹⁻ and hydrotalcite model using a clay forcefield⁽⁵⁾, in order to simulate the ionic interaction with the surface and also the charge stabilization of the system. With our molecular model was possible to reproduce atomic force microscopy experimental data⁽⁶⁾. Protonation influences on the adsorption process are also presented.

Keywords: Adsorption, Hydrotalcite, MBSA, Dye.

References

- [1] P. K. Dutta and M. Puri, J. Phys. Chem. 93, 376 (1989); H. C. B. Hansen and R. M. Taylor, Clay Miner. 26, 311 (1991).
- [2] W. T. Reichle, S. Y. Kang, D. S. Everhardt, J. Catal. 101, 352 (1986).
- [3] P. C. Schmidt, K. Benke, Pharm. Acta Helv. 63,188 (1988); Z. Kokot, Pharmazie 43, 249 (1988); J. L. Fabregas and J. Cucala, Int. J. Pharmacognosy 52, 173 (1989).
- [4] K. Itaya, H.-C. Chang, I. Uchida, Inorg. Chem. 26, 624 (1987); D. Ege, P. K. Ghosh, J. R. White, J. F. Equey, A. J. Bard, J. Am. Chem. Soc. 107, 5644 (1985).
- [5] Cygan, R. T.; Liang, J.-J.; Kalinichev, A. G. J. Phys. Chem. B 2004, 108, 1255.
- [6] Cai, H.; Hillier, A. C.; Franklin, K. R.; Nunn, C. C.; Ward, M. D.; Science 1994, 266, 1551.



ADSORCIÓN DE CADENAS AUTO-ENSAMBLADAS SOBRE REDES (P-50)

L.G. López ^{(1)*}, A.J. Ramirez-Pastor ⁽¹⁾

⁽¹⁾ Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis, INFAP-CONICET, ARGENTINA

*lglopez@unsl.edu.ar

RESUMEN

Mediante simulación de Monte Carlo en la asamblea gran canónica, estudiamos la adsorción de monómeros (con dos polos atractivos) sobre superficies homogéneas. Dichas unidades son capaces de auto-ensamblarse formando cadenas lineales con orientaciones discretas relativas al sustrato. En el modelo considerado aquí, la superficie está representada por una red bidimensional (cuadrada o triangular) y una transición de fase orientacional continua tiene lugar, conforme la temperatura disminuye o la densidad numérica de partículas aumenta. El proceso ha sido monitoreado siguiendo el comportamiento de las isothermas de adsorción (potencial químico como función del cubrimiento) para diferentes valores de temperatura. Los datos numéricos fueron comparados con predicciones analíticas de campo medio y funciones exactas, tanto para sistemas no interactuantes como para sistemas interactuantes unidimensionales. Los resultados obtenidos revelan la existencia de tres regímenes de adsorción, según sea la temperatura. Además, los diagramas de fases fueron calculados a partir de las singularidades en las isothermas de adsorción, mostrándose estas como cantidades sensibles a la transición. Estos y otros resultados se exponen y se discuten en el presente trabajo.

Palabras clave: Auto-ensamblado, Cadenas, Comportamiento crítico, Orden nemático.

Referencias

[1] López, L.G.; Ramirez-Pastor, A.J. *Adsorption of Self-Assembled Rigid Rods on Two Dimensional Lattices*, Langmuir, (2012), 14917 – 14924.



ESTUDIOS DE ADSORCIÓN DE NITRÓGENO COMBINANDO ISOTERMAS EXPERIMENTALES Y SIMULACIÓN DE MONTE CARLO PARA OBTENER LA DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑOS DE PORO DE CARBONES TIPO CMK-3 (P-51)

V. Cornette*, J.C.A. de Oliveira, D. Barrera, M. Dávila, K. Sapag, R.H. López

Dpto. de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis- CONICET, Ejército de Los Andes 950, (D5700HHW), San Luis, ARGENTINA

*cornette@unsl.edu.ar

RESUMEN

Los problemas energéticos y ambientales han creado la necesidad de diseñar nuevos materiales que puedan ser usados en procesos más eficientes con una elevada selectividad. Los carbones nanoestructurados (CN) han atraído la atención debido a sus propiedades fisicoquímicas, las cuales son útiles en diversas aplicaciones tales como: procesos de separación (CH_4/CO_2 y N_2/O_2), almacenamiento de gases (CH_4 y H_2), captura de gas (CO_2) y almacenamiento de energía como electrodos de baterías y supercapacitores.

En este trabajo, se presenta un modelo molecular realista que permite estudiar carbones mesoporosos nanoestructurados (tipo CMK-3), el cual trata de describir la morfología y topología del poro en una forma más realista. Las simulaciones de adsorción del gas fueron realizadas utilizando el método de simulación de Monte Carlo en la asamblea gran Canónica para caracterizar los carbones ordenados.

Los resultados obtenidos muestran un buen acuerdo con la isoterma experimental de nitrógeno a 77K. Este primer paso de vincular la simulación a la síntesis y caracterización de esta clase de materiales es la base para optimizar sus posibles aplicaciones.

Adicionalmente, los resultados para la distribución de tamaños de poro fueron comparados con los reportados recientemente por medio del método de QSDFT y NLDFT.

Palabras clave: Adsorción, simulación de Monte Carlo, Carbones nanoestructurados.



TERMODINÁMICA DE ADSORCIÓN DE PARTÍCULAS INTERACTUANTES ADSORBIDAS EN NANOPARTÍCULAS ICOSAÉDRICAS Y OCTAÉDRICAS TRUNCADAS (P-52)

**O.A. Pinto^{(1)*}, B. Lopez de Mishima⁽¹⁾, M. Dávila⁽²⁾, A.J. Ramirez-Pastor⁽²⁾,
O.A. Oviedo⁽³⁾, E.P.M. Leiva⁽³⁾**

⁽¹⁾ Centro de Investigaciones y Transferencia de Santiago del Estero, CITSE-CONICET, Universidad de Santiago de Estero, ARGENTINA

⁽²⁾ Departamento de Física, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA

⁽³⁾ Instituto de Físicoquímica de Córdoba, Departamento de Matemática y Física de la Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, ARGENTINA

*oapinto2010@gmail.com

RESUMEN

En este trabajo se estudia la termodinámica de adsorción de partículas interactuantes adsorbidas en nanopartículas icosaédricas y octaédricas truncadas, a partir de una aproximación teórica de campo medio detallado y simulación de Monte Carlo [1]. El modelo de gas de red tiene en cuenta diferentes tipos de sitios y de energías de adsorción, de acuerdo a su coordinación con los primeros vecinos. Se analizan las isotermas de adsorción para un amplio rango de interacciones físicas y químicas, y diferentes tamaños de nanopartículas.

Palabras clave: nanopartículas, adsorción, campo medio detallado

Referencias

[1] Pinto, O. A.; López de Mishima, B. A.; Leiva, E. P. M.; Oviedo, O. A. *Computer simulation of adsorption on nanoparticles: The case of attractive interactions*. Phys. Rev. E, (2012), 86, 061602 .

SIMULACIÓN POR EL MÉTODO MCGC DE ISOTERMAS DE ADSORCIÓN DE N₂ SOBRE MATERIALES MESOPOROSOS SBA-15 (P-53)

M. Ponce ⁽¹⁾, J.C.A. de Oliveira ⁽²⁾, R.H. López ⁽²⁾, F. Rojas ⁽¹⁾*

⁽¹⁾ Área de Físicoquímica de Superficies, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Unidad Iztapalapa, MÉXICO, 09340 D.F.

⁽²⁾ Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada, CONICET-UNSL, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA.

*MARAPM22@hotmail.com

RESUMEN

El método de simulación de isotermas de adsorción por medio del procedimiento Monte Carlo Gran Canónico (MCGC) representa el espacio poroso como una colección de huecos con una forma determinada (e.g. cilindros); en este trabajo se presenta una aproximación a un sólido real con imperfecciones en la superficie interna del poro. Se insertaron moléculas adicionales de SiO₂ sobre la superficie (0.05 y 0.1), con el objetivo de crear una superficie heterogénea y realizar una comparación con un material experimental SBA-15 y poder determinar el mejor ajuste, entre estos dos tipos de datos. El sólido creado es representativo de una isoterma Tipo IV con ciclo de histéresis H1, al igual que el simulado con MCGC (Figura 1). Su Distribución de Tamaños de Poro (DTP) fue calculada a partir de la Teoría de Funcionales de la Densidad No Local (TFDNL). Para este fin se creó un banco de isotermas a 76K, con radios de 1.0 a 8.0nm en intervalos de 0.5nm, para determinar la DTP mediante el método de Mínimos Cuadrados No Negativos con Regularización. Se realizó la comparación de las DTP's entre las isotermas de adsorción del sólido experimental y los obtenidos con MCGC (Figura 2).

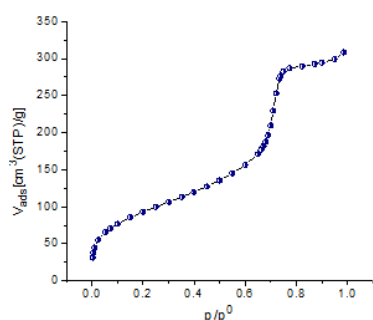


Figura 1. Isotermas de Adsorción de N₂ a 76K del sólido poroso SBA-15 experimental y simulada con MCGC

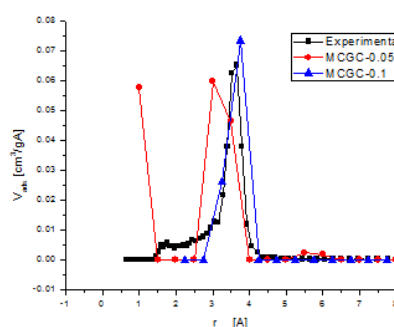


Figura 2. Curvas de DTP de adsorción del sólido poroso SBA-15 experimental y simuladas con MCGC con recubrimiento de moléculas de SiO₂ (0.05 y 0.1)

Palabras clave: Adsorción, SBA-15, MCGC, DTP.



CONDENSACIÓN CAPILAR Y DESORCIÓN EN NANOPOROS, INFLUENCIA DE LA HIDROFILICIDAD (P-54)

M. Factorovich^{(1)*}, V. Molinero⁽²⁾, D. Scherlis^{(1)**}

⁽¹⁾ Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física Universidad de Buenos Aires

⁽²⁾ Department of Chemistry, University of Utah

*matiasf@hotmail.com

**damian@qi.fcen.uba.ar

RESUMEN

Se presentan resultados de simulaciones híbridas de Dinámica Molecular-Monte Carlo Gran Canónico que reproducen isothermas de adsorción-desorción de agua en poros cilíndricos infinitos con diferentes niveles de hidrofiliicidad. La hidrofiliicidad 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 liquido vapor. En particular la presencia de una interfaz se corresponde mejor con las condiciones experimentales reales. Para poros de baja hidrofiliicidad 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



ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN Y LIBERACIÓN DE IBUPROFENO EN MOFs BIO-COMPATIBLES MEDIANTE SIMULACIONES DE GCMC (P-55)

M.C. Bernini⁽¹⁾*, D. Fairén-Jimenez^(2,3), M. Pasinetti⁽¹⁾, A. Ramirez-Pastor⁽¹⁾, R.Q. Snurr⁽²⁾

⁽¹⁾ Grupo de Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA. ⁽²⁾ Department of Chemical and Biological Engineering, Northwestern University, Evanston, Illinois, United States. ⁽³⁾ Department of Chemical Engineering and Biotechnology, University of Cambridge, United Kingdom.

*mcbernin@unsl.edu.ar

RESUMEN

Los MOFs (Metal Organic Frameworks) son compuestos cristalinos cuyas redes orgánico-inorgánicas están constituidas por clusters metálicos de distinta dimensionalidad, los cuales se autoensamblan covalentemente con ligandos orgánicos multifuncionales, generando redes poliméricas periódicas con cavidades o canales. Una de las aplicaciones más reciente de los MOFs es su uso como soportes en liberación controlada de fármacos.^[1] Las simulaciones de GCMC han sido muy útiles para comprender el proceso de adsorción de gases livianos y líquidos en materiales porosos, permitiendo predecir y explicar resultados experimentales de una manera precisa y realista.^[2] En este contexto, se han utilizado por primera vez simulaciones de GCMC para estudiar la adsorción de moléculas de un fármaco modelo (ibuprofeno) en MOFs bio-compatibles. Primeramente, los resultados fueron validados con datos experimentales disponibles para la adsorción y liberación del fármaco en MIL-53(Fe), MIL-100(Fe) y MIL-101 (Cr).^[1] Se analizó la máxima capacidad de adsorción de cada MOF; la forma de las isotermas de adsorción simuladas; la localización de las moléculas del fármaco en las estructuras porosas utilizando funciones de distribución radial (RDF) y snapshots, y la dependencia del calor isostérico de adsorción (Q_{st}) con la carga de ibuprofeno en estos MOFs. Luego, se amplió el estudio a tres MOFs bio-compatibles basados en metales no tóxicos (MOF-74 (Mg)), ligandos de carbohidratos (CD-MOF-1) y con volumen de poro en el rango de mesoporos (BioMOF-100).

Palabras clave: MOFs, GCMC, Ibuprofeno, Adsorción.

Referencias

- [1] Horcajada, P.; Gref, R.; Baati, T.; Phoebe, T.; Allan, K.; Maurin, G.; Couvreur, P.; Ferey, G.; Morris, R.E.; Serre, C. *Metal-Organic Frameworks in Biomedicine*, Chem. Rev. 2012, 112, 1232–1268.
- [2] Düren, T.; Bae, Y. S.; Snurr, R. Q. *Using molecular simulation to characterise metal-organic frameworks for adsorption applications* Chem. Soc. Rev. 2009, 38, 1237.



MOLECULAR SIMULATION OF METHANE ADSORPTION IN MIL-101 USING MONTE CARLO METHODOLOGY (P-56)

D. Gonçalves⁽¹⁾, P. Silvino⁽¹⁾, S. Lucena^{(1)*}

⁽¹⁾ Grupo de Pesquisa em Separações por Adsorção, DEQ-UFC, Universidade Federal do Ceará, BRASIL.

*lucena@ufc.br

ABSTRACT

MIL-101 is a new class of Metal-Organic Framework (MOF) material with giant pores built by the connection of hybrid microporous supertetrahedra which further assemble with formation of two types of mesoporous cages. This particular framework gives high methane storage capacities. In this study, we investigated adsorption equilibrium properties of methane in MIL-101 (Cr) using the Monte Carlo methodology in the grand canonical ensemble (GCMC). The MIL-101 (Cr) framework was constructed from crystallographic data [1]. We tested general force fields. Adsorption isotherms were performed at room temperature using two methane models, united atom (UA) [2] and atom-atom (AA) [3]. NVT simulations using argon at 30 K and methane at 150 K were carried out to estimate adsorption sites. Potential maps of selected sections of the framework were performed to give the energy of each site. We found that adsorption energy varies from 4.4 to 0.3 kcal/mol being maximum at supertetrahedra. The theoretical methane storage (V/V) capacity of MIL-101 and the isosteric heat of adsorption also were predicted.

Keywords: MIL-101, Methane and Adsorption properties

References

- [1] Férey, G.; Mellot-Draznieks, C.; Serre, C. Millange, F.; Dotour, J.; Surblé, S.; Margiolaki, I. *A chromium terephthalate-based solid with unusually large pore volumes and surface area*, Science, (2005), 2040-2042.
- [2] Martin, M. Siepmann, J. *Transferable potentials for phase equilibria. 1. United-Atom description of n-alkanes*. The Journal of Physical Chemistry B, (1998), 2569-2577.
- [3] Murad, S.; Gubbins, K. *Molecular dynamics simulation of methane using singularity-free algorithm*. Computer modeling of matter, (1978), 62-71.



ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA ADSORCIÓN DE CO SOBRE FE (1 0 0) EN LA REACCIÓN DE FISCHER-TROPSCH (P-57)

S. Amaya-Roncancio*, D. Linares, K.Sapag

Departamento de Física, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA.

*samaya@unsl.edu.ar

Resumen

Se investiga dentro del marco de la teoría del funcional de la densidad (DFT), la adsorción y disociación de CO y su reacción con H₂ para la formación de especies CH_n (CH, CH₂, CH₃, CH₄), como también la formación de productos secundarios CO₂ y H₂O en la reacción de Fischer-Tropsch (FT) sobre Fe (1 0 0). Se encuentran las energías de transición de las reacciones que forman las especies CH_n y sus productos secundarios, además de determinar cuáles son los sitios activos de adsorción y de reacción de cada especie sobre la superficie del catalizador. Se presenta un perfil del camino de reacción energéticamente más adecuado para generar la metanación del CO sobre Fe (1 0 0). Por último se presentan los caminos de reacción de la formación de todos los productos involucrados desde sus precursores hasta su resultado. Se concluye que la energía de formación de cadenas CH_n disminuye a medida que aumenta el número de hidrogenos ligados al carbono. Además, la mayor barrera de energía involucrada en el proceso se presenta en la generación del primer enlace C-H. A partir del análisis de los pasos elementales de la reacción, más concretamente, iniciación, crecimiento de especies CH_n y terminación, se puede entender si la orientación cristalina utilizada y los caminos de reacción propuestos en este trabajo se ajustan a los resultados obtenidos en la reacción FT.

Palabras clave: DFT, Catálisis, Fischer-Tropsch, Estados de Transición

Referencias:

- (1) General Rules for Predicting Where a Catalytic Reaction, Zhi-Pan Liu and P. Hu*, JACS Published on Web 01/22/2003.
- (2) CO dissociation and O removal on Co(0 0 0 1): a density functional theory study Xue-Qing Gong a, R. Raval b, P. Hu a, Surface Science 562 (2004) 247-25.
- (3) Energetics of methane dissociative adsorption on Rh{111} from DFT calculations), Bouke S. Bunnik *, Gert Jan Kramer, Journal of Catalysis 242 (20 06) 309-318.



PERCOLACIÓN DE k-MEROS EN 3D (P-58)

G. García^{(1)(2)*}, F. Sanchez-Varretti⁽¹⁾⁽²⁾, A.J. Ramírez-Pastor⁽²⁾, P. Centres⁽²⁾

⁽¹⁾ Grupo de Físico-química de Sistemas Complejos, UTN, Fac. Reg. San Rafael, ARGENTINA

⁽²⁾ Grupo de Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA

*willy_garcia_75@yahoo.com.ar

RESUMEN

La percolación de k-meros en los diversos sustratos ha sido estudiada de forma exhaustiva en sustratos bidimensionales [1]. En el presente trabajo extendemos, el análisis de percolación de sitios realizado previamente, a redes tridimensionales. Los estudios de simulación en alta dimensión han sido tradicionalmente postergados debido a la escasez de recursos analíticos y el alto costo computacional de los estudios numéricos. Debido a esto los resultados actuales se limitan a dímeros [2]. En este trabajo se reporta el umbral de percolación, como función del tamaño del k-mero depositado. También se reporta el cubrimiento máximo de la red (cubrimiento de jamming) como función del tamaño del k-mero depositado.

Palabras clave: k-meros, Monte Carlo, percolación

Referencias

- [1] V. Cornette, A.J. Ramirez-Pastor, F. Nieto. *Percolation of polyatomic species on a square lattice*, The European Physical Journal B, (2003), 391–399.
- [2] Yu. Yu. Tarasevich and V. A. Cherkasova. *Dimer percolation and jamming on simple cubic lattice*, The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems, 2007, vol. 60, issue 1, 97-100.



LA CONVERGENCIA DE LOS MODELOS WANG LANDAU, DEPENDE DEL PROBLEMA FÍSICO? (P-59)

R. Belardinelli^{(1)*}, S. Manzi⁽¹⁾, V. Pereyra⁽¹⁾

⁽¹⁾ Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada (INFAP – CONICET), Universidad Nacional de San Luis

*rbelar@unsl.edu.ar

RESUMEN

En este trabajo se analiza la evolución dinámica de distintos modelos de crecimiento, donde el tamaño vertical de la partícula disminuye con el tiempo de acuerdo a una determinada funcionalidad, $F(t)$. El estudio está motivado por la evolución del error en los algoritmos de simulación de Monte Carlo basados en el método de histograma plano. En particular, se analiza el conocido algoritmo de Wang-Landau [1] y su versión modificada, el algoritmo de $1/t$ [2]. La función de decrecimiento, $F(t)$, viene dada por la forma funcional del parámetro refinamiento de los algoritmos. Distintos comportamientos son observados para la altura media $\langle h(t) \rangle$ y el ancho de la interfaz $w(t, L)$, dependiendo del modelo analizado [3]. Sin embargo, en ningún caso se observa algún tipo de ley de escala para la altura y la anchura de la interfaz. Para el modelo de deposición al azar de la anchura de la interfaz, $w(t, L)$, alcanza un valor de saturación, para cualquier $F(t)$. Basado en el comportamiento de la anchura de la interfaz, es posible explicar la convergencia del algoritmo de $1/t$, así como la saturación en el error en el algoritmo de Wang-Landau, sin considerar argumentos físicos.

Palabras clave: Wang landau, Growth Interface.

Referencias

- [1] F. Wang and D.P. Landau, "Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states" Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
- [2] R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, "Fast algorithm to calculate density of states". Phys. Rev. E **75**, 046701 (2007).
- [3] A. Barabasi and H. E. Stanley, "Fractal Concepts in Surface Growth", Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995.



UN TEOREMA QUE PERMITE OBTENER ECUACIONES DE EVOLUCIÓN DETERMINISTAS CONTINUAS A PARTIR DE ECUACIONES ESTOCÁSTICAS DISCRETAS (P-60)

G. Constanza

⁽¹⁾ Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis, San Luis, ARGENTINA

RESUMEN

Se prueba que ecuaciones discretas estocásticas de evolución permiten obtener ecuaciones deterministas continuas luego de realizar un promedio sobre realizaciones de las estocásticas.

Palabras clave: Evolution equations, Stochastic processes



COMPORTAMIENTO CRÍTICO DE SEGMENTOS LINEALES ADSORBIDOS SOBRE UNA RED (P-61)

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 la 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).



EXPERIMENTOS SOBRE LA INVERSIÓN DE SELECTIVIDAD PARA ETAPAS TEMPRANAS EN LA ADSORCIÓN DE MEZCLAS Ar-CH₄ SOBRE GRAFITO EXFOLIADO (P-62)

M. Rafti^{(1)*}, G.A. Albesa⁽¹⁾, J.L. Vicente⁽¹⁾, A.D. Migone⁽²⁾

⁽¹⁾ INIFTA-UNLP-CONICET, La Plata, ARGENTINA
⁽²⁾ Southern Illinois University, Carbondale (IL), USA

*mrafti@quimica.unlp.edu.ar

RESUMEN

La adsorción selectiva de gases de importancia tecnológica y medioambiental es un tema de gran interés actual. Diferentes sustratos complejos como MOFs y carbones nanoestructurados ofrecen alternativas para su uso en tales operaciones. Para entender la interacción sustrato-adsorbato, comparamos los resultados obtenidos en simulaciones numéricas por Calbi y col. [1], para la adsorción de mezclas Ar-CH₄ sobre grafito exfoliado con experimentos realizados con la técnica volumétrica estática [2]. Se elige este sistema modelo debido a que por su simplicidad permite realizar un análisis libre de efectos secundarios causados por interacciones de los adsorbatos con sólidos porosos más complejos. Como resultado, confirmamos la existencia (predicha en las simulaciones) de un periodo de "overshoot" en donde la concentración superficial del adsorbato con menor energía de interacción con la superficie muestra un exceso con respecto al de mayor, contrario al resultado final esperado y finalmente observado.

Palabras clave: k-meros, Monte Carlo, percolación

Referencias

- [1] J.T. Burde, M.M. Calbi, Journal of Physical Chemistry C 111 (2007), pp. 5057–5063.
[2] M. Rafti, V. Kruglevicute, and A. D. Migone, "Chem. Phys. Lett.", (en prensa) DOI: 10.1016/j.cplett.2012.10.017, 2012.



2° Simposio sobre Adsorción Adsorbentes y sus Aplicaciones

ÍNDICE DE AUTORES

Acosta L.	P-34	61	De la Llave E.	P-42	69
Albesa G.A.	P-62	89	de Miguel S.	P-05	32
Amaya-Roncancio S.	P-57	84	de Oliveira J.C.A.	P-51, P-53	78, 80
Arizaga R.	P-03, P-06	29, 33	Deiana C.	P-28	55
Arrúa E.C.	P-20	47	Del Rio L.A.	P-43	70
Aspromonte S.G.	SP-7, P-35	20, 62	Denoyel R.	PL-2	7
Autié Castro G.	P-16	43	Díaz D.	P-48	75
Autié Pérez M.A.	P-16	43	Domínguez A.	SP-14, P-18	27, 45
Avena M.	SP-3, P-21	16, 48	Dos Santos Afonso, M.	PL-6	11
Azevedo D.C.S.	SP-10, P-15, P-16, P-17	23, 42, 43, 44	Eimer G.	P-02, P-04, P-13	28, 30, 40
Bálsamo N.	P-04	30	Elías V.	P-02, P-13	28, 40
Bandosz T.	PL-5	10	Esparza J.M.	SP-14, P-18	27, 45
Barbera G.	P-03	29	Etcheverry M.	P-29	56
Barrera D.	P-07, P-09, P-51	34, 36, 78	Factorovich M.	P-54	81
Basaldella E.I.	P-06, P-36	33, 63	Fairén-Jimenez D.	P-55	82
Baschini M.	P-44	71	Farfán Torres E.M.	P-26	53
Belardinelli R.	P-59	86	Farruggia B.	P-20	47
Bernini M.C.	P-55	82	Felipe C.	SP-14	27
Bertolini G.	P-03, P-06	29, 33	Fernandez M.E.	P-30, P-33	57, 60
Boix A.V.	SP-7, P-35	20, 60	Fertitta A.E.	P-37	64
Bonelli P.R.	SP-8, P-30, P-31, P-33	21, 57, 58, 60	Ferullo R.	P-32	59
Botto I.L.	P-25	52	Flores F.M	P-46	73
Bourrelly S.	PL-8	13	Franceschini E.	P-05	32
Braga B.M.	P-49	76	Gamba M.	P-46	73
Bruno M.	P-05	32	Garcés S.I.	P-11	38
Cabello C.I.	P-03, P-06	29, 33	García Blanco A.A	P-04, P-08, P-12	30, 35, 39
Calleja G.	PL-4	9	García G.	P-58	85
Campodall' Orto V.	P-43	70	García M.G.	P-14	41
Carraro P.	P-13	40	Ghilarducci A.A.	P-07	34
Carreño Y.	P-34	61	Giacomelli C.E.	P-19	46
Castellani N.	P-32	59	Gil A.	P-11	38
Castrillo N.	P-23	50	Gimenez M.	P-28	55
Cavalcante Jr. C.	P-15, P-16	42, 43	Giraldo L.	P-36	63
Cecilia J.A.	P-15	42	Gonçalves D.	P-17, P-56	44, 83
Centres P.M.	P-48, P-58	75, 85	Gonçalves R.	P-17	44
Coelho J.V.	P-38	65	González Clar P.Y.	P-43	70
Constanza G.	P-60	87	González M.J.	P-25	52
Copello G.J.	P-43	70	Gonzalez M.R.	P-36	63
Cornette V.	P-51	78	González Solveyra E.	P-42	69
Corti H.	P-05	32	Heredia A.C.	P-34	61
Crivello M.	SP-9, P-02, P- 04, P-22, P-34	22, 28, 30, 49, 61	Hernández Obregón J.	P-16	43
Cuello N.	P-02	28	Herrero E.	P-04, P-34	30, 61
Cukierman A.L.	P-30, P-31, P-33	57, 58, 60	Hervé D.M.	P-08	35
Cuscueta D.J.	P-07	34	Huck L.	P-24	51
Dávila M.	P-07, P-51, P-52	34, 78, 79	Huertemendía Marín M.	P-08	35
			Huespe V.J.	P-47	74



2° Simposio sobre Adsorción Adsorbentes y sus Aplicaciones

Húmpola P.D.	P-37	64	Nunell G.V.	P-30, P-33	57, 60
Ilari R.	P-29	56	Ochoa N.A.	P-14, P-48	41, 75
Jagiello J.	PL-3	8	Odetti H.S.	P-37	64
Jiménez-López A.	P-15	42	Ojeda R.	P-18	45
Kaneko K.	SP-1	14	Oliva M.	P-02, P-04, P-13, P-34	28, 30, 40, 61
Katusich O.	P-39	66	Oliveira L.C.	SP-4, P-38	17, 65
Korili S.A.	P-11	38	Olivier J.P.	PL-3, SP-1	8, 14
Kornhauser I.	SP-14	27	Oviedo O.A.	P-52	79
Lamarra J.	P-27	54	Paredes V.	PL-7	12
Lázaro Martínez J.M.	P-43	70	Parello M.L.	P-19	46
Legnoverde Rey M.S.	P-06	33	Pasinetti M.	P-45, P-55	72, 82
Leiva E.P.M.	P-52	79	Pecini S.E.	P-21	48
Levin G.	P-43	70	Pereira M.C.	P-38	65
Linares D.	P-57, P-61	84, 88	Pereyra A.M.	P-36	63
Llewellyn P.	PL-2, PL-8	7, 13	Pereyra V.	P-59	86
Lombardi B.	P-40	67	Pérez C.	SP-9, P-22	22, 49
Lombardo Lupano L.V.	P-43	70	Pinto O. A.	P-45, P-52	72, 79
Lombardo M.V.	P-41	68	Ponce M.	SP-14, P-53	27, 80
Lopez de Mishima B.	P-52	79	Quintana M.	P-01	28
López L.G.	P-50	77	Quiroga E.	P-48	75
López R.H.	P-51, P-53	78, 80	Rafti, M.	P-62	89
Lucena S.	P-17, P-49, P-56	44, 76, 83	Ramirez-Cuesta A.J.	SP-5	18
Luengo C.	P-32	59	Ramirez-Pastor A.J.	P-45, P-50, P- 52, P-55, P-58	72, 77, 79, 82, 85
Mambrini R.	P-10	37	Ramos M.E.	P-31	58
Manero J.M.	PL-7	12	Reguera Ruiz E.	P-16	43
Manzi S.J.	P-47, P-59	74, 86	Ríos S.M.	P-39	66
Marchese J.	P-14, P-48	41, 75	Roca Jalil M.E.	P-44	71
Martínez Stagnaro S.	P-24	51	Rodríguez Castellón E.	PL-7, P-15, P-16	12, 42, 43
Martínez-Escandell M.	SP-6	19	Rodríguez-Estupiñán P.	P-36	63
Masy W.	P-47	74	Rodriguez-Reinoso F.	PL-1, SP-1, SP-6	5, 14, 19
Matoz D.	P-61	88	Rojas F.	SP-14, P.53	27, 80
Mendieta S.	SP-9, P-22	22, 49	Rojas R.	P-19	46
Menezes I.R.S.	P-10	37	Rouquerol F.	PL-2	7
Mercado A.	P-23	50	Rouquerol J.	PL-2, PL-8	7, 13
Migone A.D.	P-62	89	Salvagni E.	PL-7	12
Miranda M.V.	P-43	70	Sámamo Alonso C.	P-16	43
Miró E.E.	SP-7, P-35	20, 60	Sanchez-Varretti F.	P-58	85
Molinero V.	P-54	81	Santos S.M.L.	P-15	42
Molinero V.	P-42	69		P-07, P-08, P- 09, P-10, P-11, P-12, P-13, P- 28, P-44, P-51, P-57	34 - 40, 55, 71, 78, 84
Montero Lago R.	SP-12	25	Sapag K.		
Moreno M.S.	P-07, P-09	34, 36			
Moreno-Piraján J.C.	P-36	63	Sardella F.	P-28	55
Moura F.C.C.	P-10	37	Sattler F.A.	P-37	64
Munguía L.	P-18	45	Scherlis D.	P-42, P-54	69, 81
Naranjo P.M.	P-26	53	Scian A.N.	P-40	67
Neimark A.V.	SP-1	14	Serra R.M.	SP-7, P-35	20, 60
Nieto F.	P-45	72			
Nudelman N.	P-39	66			



2° Simposio sobre Adsorción Adsorbentes y sus Aplicaciones

Silva A.C.	P-38	65
Silva Jr. I.	SP-10	23
Silvestre-Albero J.	SP-6	19
Silvino P.	P-17, P-56	44, 83
Sing K.S.W.	SP-1	14
Snurr R.Q.	P-55	82
Soares Maia D.	P-07	34
Soler-Illia G.J.A.A.	SP-2, P-41, P-42	15, 68, 69
Soto E.L.	P-25	52
Spelzini D.	P-20	47
Takara A.	P-48	75
Teixeira A.R.	P-38	65
Thommes M.	SP-1	14
Torres Sánchez R.M.	SP-11, P-27, P-46	24, 54, 73
Trivi M.	P-03, P-06	29, 33
Vallone A.	P-12	39
Veizaga N.	P-05	32
Vicente J.L.	P-37, P-62	64, 89
Videla M.	P-41	68
Vilarrasa-García E.	P-15	42
Villarroel-Rocha J.	P-10, P-11	37, 28
Viva F.	P-05	32
Volzone C.	SP-13, P-23, P-24	26, 50, 51
Wiersum A.	PL-8	13
Zanini C.	P-10	37
Zanini G.	P-29	56
Zenobi C.	P-10, P-29	37, 56