



UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS
RECTORADO

PLANILLA ANEXA I
PRESENTACION DE CURSOS DE POSGRADO

| | |
|--|--|
| FACULTAD: DE CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS Y NATURALES | |
| DENOMINACION DEL CURSO: Caracterización de medios porosos CATEGORIZACIÓN DEL CURSO: Perfeccionamiento | |
| RESPONSABLE: Raúl Horacio López TÍTULO: Doctor en Física INSTITUCIÓN DE ORIGEN: UNSL | Documento: 21.704.353 e-mail: rlopez@unsl.edu.ar CEI: III Categoría CONICET: Inv. Adjunto. |
| CO-RESPONSABLE: Karim Sapag TÍTULO: Doctor en Ciencias INSTITUCIÓN DE ORIGEN: UNSL | Documento: 16.332.699 e-mail: sapag@unsl.edu.ar CEI: 2 Categoría CONICET: Inv. Independiente |
| COLABORADOR: Juan Pablo Toso TÍTULO: Doctor en Física INSTITUCIÓN DE ORIGEN: UNSL | Documento: 13.335.523 e-mail: jtoso@unsl.edu.ar CEI: Categoría CONICET: |
| AUXILIAR: Jose Carlos Alexandre De Oliveira TÍTULO: Ingeniero Químico INSTITUCIÓN DE ORIGEN: UNSL | Documento: 94.634.387 e-mail: alex@unsl.edu.ar CEI: Categoría CONICET: Becario de Posgrado. Tipo II. |
| COORDINADOR: Dr. Raúl López | e-mail: rlopez@unsl.edu.ar |
| MODALIDAD DE DICTADO: presencial CRÉDITO HORARIO: 40 horas presenciales. | |
| DESTINATARIOS: Egresados de Universidades Nacionales o Privadas de carreras mayores en el área disciplinar de la Física, Química, Matemática, Informática, Ingeniería Química, en Petróleo, en Materiales e Ingeniería Electrónica. Para egresados de otras carreras con fuerte componente en Ciencias Básica o Ingeniería, el profesor responsable decidirá sobre la admisión extraordinaria ante solicitud fundamentada. CUPO: 20 (veinte) personas | |
| FUNDAMENTACIÓN: Se trata de un curso regular del Plan de Estudios de la Maestría en Ciencias de Superficies y Medios Porosos y del Doctorado en Física que conduce a la especialización en: 1. Los fenómenos moleculares que ocurren en la superficie de los sólidos y sus aplicaciones. 2. La caracterización de medios porosos y las propiedades de penetración y retracción de fluidos en dichos medios 3. Procesos de adsorción de gases puros y de sus mezclas en materiales porosos. 4. Modelado computacional de procesos fisicoquímicos en nanomateriales. La formación será teórico-experimental y de simulación por computadora, haciéndose uso de los más avanzados métodos teóricos, experimentales y de simulación numérica, enfocados a los problemas que están en la frontera del conocimiento actual en el campo de la Ciencia de Superficies y Medios Porosos. | |



OBJETIVOS: Introducir al alumno al estudio, modelado y caracterización de los medios con estructura porosa. Contribuir al conocimiento de los procesos que ocurren en los materiales porosos tales como llenado volumétrico, drenaje, etc.

CONTENIDOS MINIMOS: Modelos de estructuras porosas. Histeresis capilar: conjuntos de capilares independientes de diferentes formas geométricas, redes capilares interconectadas (modelos de sitios y enlaces). Microporosidad. Adsorción en sólidos Nanoporosos. Análisis de las isotermas de adsorción. Teoría del llenado volumétrico y otras. Drenaje. Imbibición. Conceptos de percolación invasiva. Métodos experimentales: porosimetría de mercurio. Modelado computacional de nano y micro materiales.

PROGRAMA: (Version-on-line: <http://www0.unsl.edu.ar/~rlopez/index0.html>)

1.- Conceptos básicos

Adsorción física, historia definiciones, parámetros estructurales, la isoterma de adsorción, fuerzas de adsorción, sólidos porosos y no porosos, parámetros estructurales de sólidos porosos, clasificación de isotermas de adsorción, clasificación de ciclos de histéresis, distribución de tamaño de poros, simposia sobre sólidos porosos y fenómenos capilares.

2.- Adsorción sobre sólidos no porosos

La isoterma de adsorción Tipo II, monocapa, multicapa, el modelo de Langmuir, la teoría BET, el punto B, la isoterma estándar, ecuación de Frenkel-Halsey-Hill, la ecuación de Harkins-Jura, gráficos t, gráficos, gráficos de comparación, isotermas escalonadas.

3.- Adsorción sobre sólidos porosos

La isoterma de adsorción Tipo IV, ecuación de Young-Laplace, ecuación de Kelvin, tratamiento BdB (Broekhoff-de Boer), método BJH para la determinación de la distribución de tamaño de poros.

4.- Adsorción en sólidos microporosos

La isoterma de adsorción Tipo I, la interpretación clásica de Langmuir, campo de fuerzas de adsorción en microporos, el llenado volumétrico de microporos, la ecuación de Dubinin-Raduskevich, la ecuación de Dubinin-Asthakov, métodos de preadsorción.

5.- Modelado computacional de sólidos porosos.

Modelo Dual de Sitios y Enlaces. Definiciones de sitios y enlaces, Principio de Construcción de Redes Porosas, Leyes Autoconsistentes para construir medios porosos.

Cálculo de las isotermas de adsorción de gases puros, sus mezclas y de los calores de adsorción en poros individuales de distinta geometría mediante el Método de Simulación de Monte Carlo en el Gran Canónico. Procedimientos para obtener las distribuciones de tamaño de poros (Comparación con métodos NLDF y el reciente QSDFT). Método de regularización.

Introducción a la teoría de percolación. Percolación Invasiva con y sin entrapamientos.

Algoritmos computacionales recursivos y del tipo Hoshen-Kopelman. Cálculo de exponentes críticos.

II. Experimental.

1. Métodos experimentales para determinar isotermas de adsorción

Principio de operación de un instrumento volumétrico, principio de operación de un instrumento gravimétrico, desgasificación del adsorbente.

2. Síntesis de sólidos porosos MCM-41, SBA-15 y SBA-16.

3. Caracterización por adsorción física. Evaluación de parámetros estructurales fundamentales

4. Porosimetría de mercurio.

SISTEMA DE EVALUACIÓN: Asistencia y aprobación del 100% de los trabajos prácticos de



aula. Aprobación de examen final.

BIBLIOGRAFÍA:

- S.J. Gregg, and K.S.W. Sing, Adsorption, Surface Area and Porosity, Academic Press, 1982
- S. Brunauer, The Adsorption of Gases and Vapors, Princeton University Press, Princeton 1945.
- F. Rouquerol, J. Rouquerol and K. Sing, Adsorption by Powders and Porous Solids: Principles, Methodology and applications. Academic Press 1999.
- Lowell, Shields, Thomas and Thommes. Kluwer. Characterization of Porous Solids and Powders: Surface Area, Pore Size and Density. Academic Publishers. (2003)
- M. Sahimi. Flow and Transport en Porous Media and Fractured Rock, VCH(1995).
- Landau and Binder. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. 2Ed. Cambridge University Press. (2005).
- Nicholson and N.G. Parsonage, Computer Simulation and the Statistical Mechanics of Adsorption, Academia Press, 1982.
- D Stauffer Stauffer , Amnon Aharony, Introduction To Percolation Theory. Taylor & Francis Ltd. 1994 2Ed.
- Percolation Effects on Adsorption-Desorption Hysteresis. R. H. López, A. M. Vidales and G. Zgrablich. Langmuir. 16, 6999 (2000).
- How does a patchy network affect the structure of invading percolation patterns. Raúl H. López, A. M. Vidales, A. Domínguez Ortiz and G. Zgrablich. Colloids and Surfaces, A: Physicochem and Eng. Asp. 300, 122-128 (2007)
- "Characterization of PSD of Activated Carbons by Using Slit and Triangular Pore Geometries". D. C. S. Azevedo, R. B. Rios, R. H. López, A. E. B. Torres, C. L. Cavalcante, J. P. Toso, G. Zgrablich. Applied Surface Science.(2010) 256 (17), pp. 5191-5197.
- "Monte Carlo simulation strategies to predict CO₂-CH₄ adsorption on activated carbons from pure gas isotherms". J. de Oliveira, R. B. Rios, R. H. López, H. R. Peixoto, V. Cornette, A. Eurico B. Torres, Célio L. Cavalcante Jr., Diana C. S. Azevedo and Giorgio Zgrablich. Adsorption Science & Technology. 29, 7 pp 651-662 (2011).

CALENDARIO DE ACTIVIDADES: Viernes de 10 a 12 y de 15 a 17.

FECHA DICTADO DEL CURSO: Inicio 5 de Abril de 2013. Finalización: 5 de Junio de 2013.

LUGAR DE DICTADO: Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada, UNSL

FECHA PREVISTA PARA ELEVAR LA NÓMINA DE ALUMNOS APROBADOS: Al finalizar el cursado y aprobación de los exámenes finales. Aproximadamente en Octubre- Noviembre del año en curso.

ARANCEL: Sin costo.

COSTOS Y FUENTES DE FINANCIAMIENTO: Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales, UNSL

* detallar el % de horas presenciales y horas no-presenciales, según lo establecido en el Título V, Capítulo IV, Art. 135°, ítem III.

San Luis, 7 de Diciembre de 2012.

.....
Coordinador del Curso

.....
Profesor Responsable del Curso