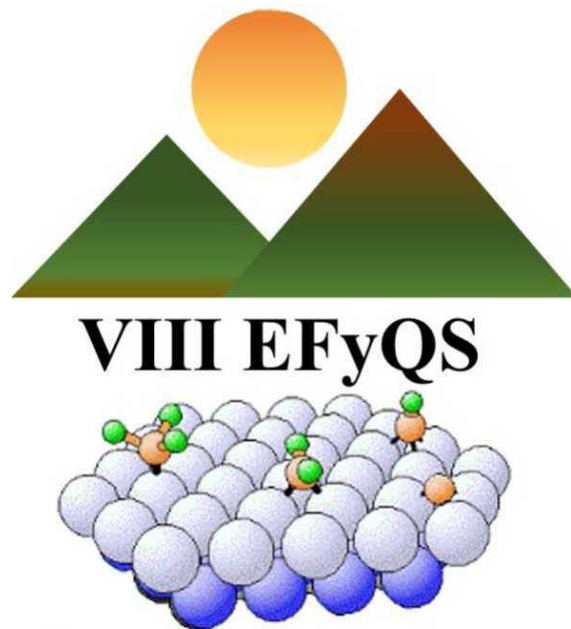


VIII Encuentro de Física y Química de Superficies
EFyQS 2018



24 al 26 de octubre de 2018
San Luis, San Luis, Argentina



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



Centro Científico Tecnológico San Luis

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas



**Agencia Nacional de Promoción
Científica y Tecnológica**



**Instituto de
Física Aplicada**



**Instituto de Investigación
en Tecnología Química**

Comité Organizador

Dr. Daniel H. Linares - INFAP-UNSL
Dr. Mario Passeggi (h) - IFIS-UNL
Dr. Octavio J. Furlong - INFAP-UNSL
Dr. José Ramírez Pastor - INFAP-UNSL
Dr. Karim Sapag - INFAP-UNSL
Dr. Raúl H. Lopez - INFAP-UNSL
Dr. Marcelo Nazzarro - INFAP-UNSL
Dr. Sergio Manzi - INFAP-UNSL
Dra. Celeste Bernini - INTEQUI-UNSL
Dr. Marcelo Pasinetti - INFAP-UNSL
Dra. Deicy Barrera - INFAP-UNSL
Dra Valeria Cornette - INFAP-UNSL
Dr. Paulo Centres - INFAP-UNSL
Dr. Sebastián Amaya - INFAP-UNSL
Dr. Andrés García - INFAP-UNSL
Mg. Mónica González - UNSL
Tec. Marcela Corallo - INFAP-UNSL
Prof. Adriana Gallard - INFAP
Lic. Julio César Ochoa Saldaña – INFAP
Lic. Lucía Soledad Ramirez - INFAP
Dra. María Martha Barroso Quiroga - INTEQUI
Ing. Diego Orlando Gabutti - INFAP

Comité Científico

Dr. Celso M. Aldao, INTEMA, Mar del Plata
Dra. Silvina Bengió, CAB, Bariloche
Dra. Bárbara Blum, INIFTA, La Plata
Dra. Gabriela Cabeza, UNS, Bahía Blanca
Dr. Daniel Linares, UNSL, San Luis
Dra. Alejandra Martínez, IFIR, Rosario
Dr. Luis Otero, UNRC, Río Cuarto
Dr. Damián Scherlis, INQUIMAE, Bs. As.
Dr. Mario C. G. Passeggi (h), IFIS, Santa Fe
Dr. Fernando Cometto, INFIQC, Córdoba

Comunicación oral 14: viernes 26 – 10.40hs

Adsorción de varias especies o “mezclas” sobre sustratos sólidos

J. I. Lopez-Ortiz^{1,2}, E. Quiroga^{1,3}, C. F. Narambuena¹, F. O. Sanchez Varretti¹, J. L. Riccardo^{1,4},
A. J. Ramirez-Pastor^{1,4} *

¹ Instituto de Física Aplicada, CONICET-UNSL, Argentina

² Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales - UNSL, Argentina

³ Laboratorio de Membranas y Biomateriales, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia - UNSL, Argentina

⁴ Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales - UNSL, Argentina

* antorami@unsl.edu.ar

En este trabajo presentamos la termodinámica estadística de mezclas de especies poliatómicas adsorbidas sobre sustratos n -dimensionales. El proceso de adsorción ha sido descrito a través de las isotermas totales y parciales, la energía de adsorción y la entropía configuracional de la fase adsorbida. En primer término, las funciones termodinámicas calculadas para una mezcla monómero-dímero son aplicadas para describir la adsorción de mezclas de metano-etano en zeolitas. El formalismo teórico reproduce las principales características del sistema, mostrando que el desplazamiento de etano por metano a altas presiones, un fenómeno conocido como adsorción reversa (Adsorption Preference Reversal), es el resultado de la diferencia de tamaño (o número de sitios ocupados) entre las especies adsorbidas ¹⁻³.

En segundo lugar, se estudia la adsorción sobre hielo de proteínas anticongelantes (AFPs, antifreeze proteins) con una estructura de dos y tres dominios ^{4,5,6}. Las AFPs se encuentran en algunos seres vivos, como hongos, plantas, vertebrados y bacterias, expuestos a condiciones extremas de baja temperatura. Estas proteínas son adsorbidas sobre el cristal de hielo impidiendo así la muerte celular por congelamiento. La teoría presentada aquí es capaz de predecir la proporción entre el grado de cobertura correspondiente a diferentes conformaciones de la proteína en el mismo estado energético ^{7,8}. Esto representa un avance respecto a modelos previos que no distinguen entre diferentes estados de adsorción ^{4,5}.

En ambos problemas, adsorción de metano-etano en zeolitas y adsorción de AFPs en hielo, los resultados teóricos fueron validados mediante la comparación con resultados obtenidos usando simulación de Monte Carlo.

Referencias

1. Dunne, L. J., Manos G., Du. Z. "Exact statistical mechanical one-dimensional lattice model of alkane binary mixture adsorption in zeolites and comparison with Monte-Carlo simulations" *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 377, No 5-6, 551-556, 2003.
2. Dávila, M., Riccardo, J.L., Ramirez-Pastor, A. J. "Exact statistical thermodynamics of alkane binary mixtures in zeolites: New interpretation of the adsorption preference reversal phenomenon from multisite-occupancy theory" *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 477, No. 4-6, 402-405, 2009.
3. Matoz-Fernandez, D. A., Ramirez-Pastor, A. J. "Adsorption preference reversal phenomenon from multisite-occupancy theory for two-dimensional lattices" *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 610-611, 131-134, 2014.
4. Can, Ö., Holland, N.B. "Modified Langmuir isotherm for a two-domain adsorbate: Derivation and application to antifreeze proteins" *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 329, 24-30, 2009.
5. Can, Ö., Holland, N.B. "Utilizing Avidity To Improve Antifreeze Protein Activity: A Type III Antifreeze Protein Trimer Exhibits Increased Thermal Hysteresis Activity" *Biochemistry*, Vol. 52, 8745-8752, 2013.
6. Quiroga, E., Ramirez-Pastor, A. J. "Statistical thermodynamics of molecules with multiple adsorption states: Application to protein adsorption" *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 556, 330-335, 2013.
7. Narambuena, C. F., Sanchez Varretti, F. O., Ramirez-Pastor, A. J. "Adsorption thermodynamics of two-domain antifreeze proteins: theory and Monte Carlo simulations" *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Vol. 18, No 35, 24549-24559, 2016.
8. Lopez-Ortiz, J. I., Torres, P., Quiroga, E., Narambuena, C. F., Ramirez-Pastor, A. J. "Adsorption of three-domain antifreeze proteins on ice: a study using LGMMAS theory and Monte Carlo simulations" *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Vol. 19, No 46, 31377-31388, 2017.