

Estudio del potencial de interacción del fenol con grafito y materiales carbonosos

Odetti, Héctor S. ⁽¹⁾; Bottani, Eduardo J. ⁽²⁾

(1) Cátedra de Química Inorgánica. Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas. UNL. Casilla de Correo 242 (3000) Santa Fe, Argentina. E-mail: hodetti@fbc.unl.edu.ar

(2) Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA). UNLP-CIC-CONICET. Casilla de Correo 16, Sucursal 4 (1900) La Plata, Argentina.

TE: 0221-425-9730; FAX: 0221-425-4642. E-mail: ebottani@inifta.unlp.edu.ar

RESUMEN: En este trabajo se presenta una descripción completa de los potenciales de interacción del fenol con el grafito y con materiales carbonosos amorfos. Estos potenciales son los que se utilizan en la realización de simulaciones numéricas de este sistema por el método de Monte Carlo. La molécula de fenol es representada como un conjunto de 13 sitios de interacción centrados en los átomos que la componen. El momento dipolar de la molécula de fenol es aproximado mediante la colocación de cargas parciales sobre cada uno de los átomos de la molécula.

Palabras claves: interacción - fenol - grafito - Monte Carlo.

SUMMARY: A complete description of the interaction potentials for phenol molecules adsorbed on the basal plane of graphite and amorphous carbonaceous materials are presented in this paper. The potential functions are employed in Monte Carlo numerical simulations. Phenol molecule is modeled as a collection of 13 Lennard-Jones interaction sites. The dipole moment of phenol molecule is approximated by placing electrostatic charges on each atom of the molecule.

Key words: interaction - phenol - grafito - Monte Carlo.