



# Termodinámica molecular de adsorción de fluidos empleando la teoría de funcionales de la densidad



**Víctor Manuel Trejos Montoya**  
*Fisicoquímica de Superficies. Departamento de Química,  
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa*

## Resumen

La adsorción de fluidos es la adhesión de moléculas de un fluido, ya sea simple o complejo, a una superficie sólida. Este fenómeno es superficial, ya que el fluido adsorbido no penetra ni se disuelve en la matriz o superficie sólida. La adsorción ha sido un tema de fundamental interés en diversas áreas del conocimiento, como la física y la química. En este trabajo, realizamos una revisión del fenómeno de adsorción de fluidos empleando la teoría clásica de funcionales de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés). Proporcionamos una breve descripción de conceptos básicos relacionados con DFT, tales como potenciales de interacción, funcionales de la densidad, perfiles de densidad, e isothermas de adsorción. Finalmente, discutimos las perspectivas futuras de la teoría de funcionales de la densidad, incluyendo su aplicación en el estudio de la adsorción de fluidos complejos como el agua, dióxido de azufre e hidrógeno en materiales adsorbentes sólidos de gran interés, como los sólidos nanoestructurados, entre los que destacan las redes metal-orgánicas. Estos materiales han abierto nuevas posibilidades en la optimización de procesos industriales y en la exploración de aproximaciones teóricas robustas como la DFT.

**Palabras clave:** teoría de funcionales de la densidad, adsorción de fluidos, DFT.

## Abstract

Adsorption of fluids involves the adhesion of molecules from a simple or complex fluid to a solid surface. This phenomenon is superficial, as the adsorbed fluid does not penetrate or dissolve into the solid matrix. Adsorption has been a fundamental topic of interest in various fields, such as physics and chemistry. In this work, we review the fluid adsorption phenomenon using

classical density functional theory (DFT). We provide an overview of basic concepts related to DFT, including interaction potentials, density functionals, density profiles, and adsorption isotherms. Finally, we discuss future perspectives of density functional theory, focusing on its application in studying the adsorption of complex fluids such as water, sulfur dioxide, and hydrogen on solid adsorbent materials like nanostructured solids and metal-organic frameworks. These materials have opened new possibilities for optimizing industrial processes and exploring robust theoretical approaches like classical DFT.

**Keywords:** density functional theory, adsorption, and solid surfaces.

\*Email: vtorej@izt.uam.mx

## 1. Introducción

El fenómeno de adsorción física es un caso particular del confinamiento de un fluido, donde se observa una mayor concentración del mismo en una superficie sólida. En este proceso, el fluido no penetra ni reacciona químicamente con la pared sólida, sino que se adhiere debido a fuerzas intermoleculares, como las fuerzas de Van der Waals. Actualmente, la adsorción de fluidos en superficies sólidas sigue siendo un tema de gran interés para la comunidad científica, tanto desde una perspectiva teórica como en los campos de simulación y experimentación. Este interés se debe a sus aplicaciones potenciales en diversas áreas, como la purificación de gases, la captura de dióxido de carbono y el desarrollo de materiales avanzados para almacenamiento de energía y sensores.

En la actualidad, tanto en los laboratorios de investigación como a escala industrial,

se aprovechan los cambios de concentración en el sistema para separar fluidos mediante el fenómeno de adsorción en una interfaz sólido-líquido. Este creciente interés en describir las propiedades termodinámicas de los fluidos bajo condiciones de confinamiento ha impulsado el desarrollo de nuevas teorías basadas en modelos moleculares cada vez más complejos. Estas teorías no solo mejoran nuestra comprensión fundamental del proceso de adsorción, sino que también optimizan aplicaciones prácticas en áreas como la purificación de aguas, la captura y almacenamiento de gases, y la fabricación de materiales avanzados. Dichas teorías buscan alcanzar el mismo nivel de precisión y refinamiento que los modelos actuales utilizados para sustancias en condiciones de bulto, es decir, en sistemas sin la presencia de paredes donde no ocurre la adsorción física. Los fluidos confinados en medios porosos y superficies modificadas exhiben un comportamiento físico que puede diferir significativamente del observado en los fluidos en bulto, especialmente bajo altas presiones y densidades. Las propiedades de los fluidos adsorbidos se ven fuertemente alteradas debido a que los átomos y moléculas adsorbidos sobre una superficie poseen una energía potencial distinta en comparación con su energía potencial en estado de bulto. Estas diferencias son cruciales para el diseño y optimización de procesos industriales, así como para el desarrollo de nuevos materiales con propiedades específicas. Los sistemas confinados representan una de las principales áreas de investigación debido a sus numerosas aplicaciones tecnológicas, que abarcan desde el sector aeroespacial y nanotecnológico hasta la electrónica y la industria petroquímica, entre otras. La comprensión detallada de estos sistemas permite el desarrollo de materiales y pro-

cesos innovadores, optimizando su eficiencia y funcionalidad en diversas aplicaciones industriales.

La industria química recurre a materiales porosos como zeolitas, carbón activado, arcillas y dolomitas en numerosos procesos, aprovechando su capacidad para retener fluidos a nivel molecular en sus superficies. En estos contextos, el poro del material actúa como una estructura confinante para el fluido, y el proceso mediante el cual este fluido es capturado se conoce como adsorción. El estudio de las propiedades interfaciales y de la adsorción de fluidos en contacto con sustratos sólidos ha recibido creciente atención, dada la limitada caracterización de estas interacciones, que se basa principalmente en enfoques fenomenológicos. A pesar de los avances, las teorías sobre interfases fluidas aún no han alcanzado el nivel de desarrollo de las teorías para los fluidos en bulto. Sin embargo, en los últimos años, se han realizado esfuerzos significativos para cerrar la brecha entre los resultados teóricos, de simulación y experimentales en el estudio de la adsorción. Se han logrado avances importantes en la descripción teórica de este fenómeno, impulsados por el desarrollo de nuevos enfoques teóricos a nivel molecular, el uso de métodos de simulación por ordenador y la aplicación de técnicas avanzadas que permiten examinar las capas superficiales o las regiones interfaciales de los fluidos. Además, han surgido nuevos adsorbentes sólidos de gran interés, como los tamices moleculares de carbón, los sólidos microporosos y los sólidos nanoestructurados, incluyendo las redes metal-orgánicas (MOFs, por sus siglas en inglés). Estos desarrollos han abierto nuevas posibilidades en la optimización de procesos industriales y en la exploración de aplicaciones emergentes.

El uso de nuevos materiales sólidos adsorbentes, a menudo modificados con cadenas poliméricas, se ha extendido significativamente en el estudio de fluidos de gran interés como el agua, el dióxido de carbono, el hidrógeno, entre otros. La predicción de la cantidad de fluido adsorbido durante el proceso de adsorción se basa comúnmente en el desarrollo de teorías predictivas que emplean modelos de ecuaciones de estado y simulaciones moleculares por computadora. Estas herramientas teóricas y de simulación son cruciales para los experimentales, ya que permiten predecir propiedades termodinámicas de adsorción y estudiar fenómenos superficiales que varían según el fluido de interés. Las aproximaciones teóricas y los métodos de simulación molecular por computadora proporcionan información valiosa que, en muchos casos, resulta difícil de obtener experimentalmente. Entre las propiedades estudiadas se incluyen los perfiles de densidad en el poro, las distribuciones del tamaño de poro, las funciones de correlación entre átomos cercanos, y los cambios en la cantidad de fluido adsorbido en función de propiedades termodinámicas como la presión, la densidad y la temperatura. Esto resalta la importancia de desarrollar modelos teóricos y de simulación cada vez más precisos, capaces de describir con mayor detalle la naturaleza de las interacciones presentes en los procesos de adsorción de fluidos.

El uso y desarrollo de aproximaciones teóricas cada vez más precisas, que permiten comparar sus predicciones con resultados experimentales, mejora nuestra comprensión del fenómeno de adsorción. Estas aproximaciones son cruciales para la caracterización de estructuras sólidas versátiles, como las MOFs. En esta línea, las teorías moleculares clásicas como la teoría clási-

ca de funcionales de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés) han representado un avance significativo en la comprensión del comportamiento termodinámico de fluidos confinados en superficies sólidas. La DFT ha permitido modelar con precisión una amplia gama de fenómenos relacionados con la adsorción, especialmente en situaciones donde los fluidos experimentan cambios de fase, por ejemplo, la transición de líquido a vapor o de sólido a líquido en presencia de un campo externo. En los últimos años, se han propuesto diferentes variantes de la DFT para calcular las propiedades termodinámicas de sistemas confinados. Cada una de estas versiones incorpora componentes adicionales que ofrecen nuevas versatilidades en los cálculos y grados variables de complejidad, ampliando nuestra capacidad para modelar y comprender fenómenos de adsorción en diversas condiciones. Estos desarrollos han sido fundamentales para mejorar la precisión y alcance de las predicciones teóricas, facilitando una aplicación más efectiva en la ingeniería de materiales y procesos.

A lo largo de este manuscrito, introduciremos al lector en las ventajas y desventajas de emplear la DFT para cuantificar la adsorción de fluidos en diversas superficies. Proporcionaremos una definición concisa de conceptos básicos relacionados con DFT, como los potenciales de interacción fluido - fluido, sólido - fluido, funcionales de la densidad, perfiles de densidad, tamaño de poro, diagramas líquido-vapor e isothermas de adsorción. Además, se discutirán las implicaciones prácticas y limitaciones de la DFT en la caracterización de fenómenos de adsorción. Finalmente, presentaremos algunas conclusiones y perspectivas sobre el trabajo futuro que puede desarrollarse utilizando DFT, destacando

áreas prometedoras para nuevas investigaciones y posibles aplicaciones en el campo de la adsorción de fluidos.

## **2. Potenciales de interacción fluido – fluido**

La adsorción de fluidos es el proceso mediante el cual las moléculas de un fluido se adhieren a una superficie sólida. En este proceso, las moléculas del fluido se adhieren a la superficie sin penetrar ni disolverse en la matriz del material sólido. El proceso de adsorción ha sido un tema de interés fundamental desde las perspectivas experimental, teórica y de simulación computacional. Para describir el fenómeno de adsorción de fluidos mediante la DFT, es esencial caracterizar el tipo de interacción fluido-fluido. En las aproximaciones teóricas como DFT, se utilizan potenciales intermoleculares que describen la interacción entre moléculas de un mismo fluido. Estos potenciales pueden ser continuos, sin discontinuidades en su forma matemática, o discretos, que presentan discontinuidades. Ambos tipos de potenciales son ampliamente empleados en la DFT para modelar la interacción entre moléculas de un solo componente. El uso de estos potenciales permite estudiar cómo las moléculas interaccionan y se comportan en superficies sólidas, proporcionando información clave para la caracterización de la adsorción.

A continuación, se describen las ventajas y desventajas de los potenciales continuos y discretos empleados en la DFT, destacando cómo influyen en la precisión y aplicabilidad de los modelos teóricos.

### **2.1. Potenciales continuos**

Un ejemplo clásico de potenciales continuos empleados en la DFT es el poten-

cial de Lennard-Jones (LJ), propuesto en 1924 por el físico teórico inglés John Lennard-Jones (1894-1954). Este potencial describe las fuerzas de repulsión y atracción entre moléculas del mismo tipo en un fluido. Es ampliamente empleado en la DFT para modelar la interacción fluido-fluido en el sistema. El potencial LJ se caracteriza por tres parámetros clave del fluido: el diámetro de la partícula ( $\sigma$ ), la profundidad del potencial ( $\epsilon$ ), y la distancia de interacción entre las partículas ( $r$ ). El potencial LJ es preferido en la descripción de fluidos reales debido a que es continuo, lo que asegura que sus derivadas también sean continuas. Esta característica contribuye a la estabilidad de la solución del sistema. Además, el potencial LJ ha sido extensamente estudiado en la literatura, lo que proporciona un conocimiento profundo de sus propiedades termodinámicas. Su representación de las interacciones repulsivas y atractivas entre moléculas es realista y ampliamente aceptada. Sin embargo, la desventaja de este potencial es que, en muchos casos, las derivadas o integrales en las que se involucra el potencial son complejas y no suelen tener soluciones analíticas simples. Esto a menudo requiere la implementación de soluciones numéricas, que pueden ser costosas computacionalmente.

### **2.2. Potenciales discontinuos**

El segundo grupo de potenciales empleados en la DFT es el de potenciales discretos. Estos se caracterizan por discontinuidades en su forma matemática, lo que facilita la implementación de derivadas o integrales dentro de la DFT. Estas discontinuidades permiten encontrar soluciones analíticas elegantes y eficientes que suelen ser menos costosas computacionalmente. Un destacado ejemplo de potencial

discreto es el potencial de pozo cuadrado (SW, por sus siglas en inglés), que ha sido ampliamente utilizado desde la década de 1980, especialmente en la escuela mexicana de física estadística, notablemente en el Departamento de Física de la Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Iztapalapa (UAM-Izt). Este potencial es ventajoso en simulaciones computacionales y se ha demostrado útil en la DFT, permitiendo analizar una gran variedad de fluidos adsorbidos en diferentes superficies con un menor costo computacional. Aunque el potencial de pozo cuadrado no ofrece una representación realista de las interacciones entre partículas, su versatilidad y simplicidad matemática lo hacen atractivo para modelar fuerzas repulsivas y atractivas en la DFT. Esta combinación de eficiencia y facilidad de implementación ha consolidado su uso en el estudio de fenómenos de adsorción, facilitando la exploración teórica y experimental de sistemas adsorbentes.

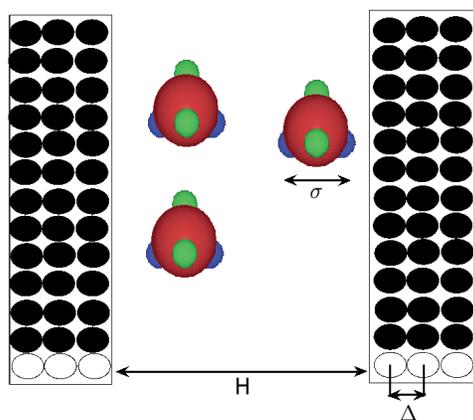
Finalmente, en ambos casos, ya sea empleando potenciales discretos o continuos dentro de la DFT, la complejidad del sistema puede aumentarse según el tipo de fluidos de interés y la interacción que se desee implementar en el estudio. Por ejemplo, en el caso del agua, este fluido se considera asociante porque forma enlaces de hidrógeno entre el par de electrones libres del oxígeno y el hidrógeno de una molécula adyacente. Estas interacciones de enlace de hidrógeno son adicionales a las interacciones repulsivas y atractivas ya contabilizadas en el potencial de interacción, y pueden integrarse en el modelo, incrementando así la complejidad del potencial. En la literatura, existen varias modificaciones a los potenciales de interacción para incluir la for-

ma molecular del fluido de estudio, como es el caso del potencial Kihara, que modela moléculas con estructuras más complejas que las esféricas. Otros potenciales, como el potencial Asakura-Oosawa, aumentan el grado de complejidad de las interacciones para estudiar sistemas más elaborados, como los coloides. Estas adaptaciones permiten abordar una mayor variedad de sistemas y proporcionan herramientas para la exploración teórica y experimental de fenómenos más complejos en la adsorción de fluidos.

### **3. Potenciales de interacción sólido - fluido**

Dentro de la DFT, además de una descripción detallada de la interacción fluido-fluido (ver Sección 2), es fundamental describir la interacción del material sólido con el fluido de interés. Para esta tarea, se utilizan los denominados potenciales de interacción sólido-fluido, que describen matemáticamente cómo interactúan las moléculas de un fluido con el material adsorbente. Estos potenciales consideran la geometría del material, que puede ser compleja, como en el caso de superficies cilíndricas o esféricas, o más simple, como en superficies cuadradas en forma de canales o rendijas. Normalmente, en la DFT se emplean ciertas simplificaciones en estos potenciales sólido-fluido para evitar una complejidad excesiva y facilitar la resolución de las ecuaciones que describen el fenómeno. Una de estas simplificaciones es asumir que la molécula es lo suficientemente grande para que la interacción solo ocurra en la dirección perpendicular a la pared, es decir, en la dirección del eje  $z$ . La descripción del material sólido se realiza en una cavidad pequeña denominada poro, y a partir de allí se extiende el análisis a toda la superficie del material.

Un ejemplo sencillo de la interacción sólido-fluido se muestra en la Fig. 1, donde se presenta una representación esquemática de cómo interactúan las partículas del fluido adsorbido con el material sólido en un poro tipo canal o rendija. Como se observa en la Fig. 2, las moléculas tienen un diámetro ( $\sigma$ ) y están confinadas entre paredes sólidas de anchura o tamaño de poro ( $H$ ). Generalmente, la pared sólida que confina el fluido puede tener múltiples capas de anchura ( $\Delta$ ) o poseer características especiales que confieren diferentes propiedades al material.



**Fig. 1.** Representación esquemática de la interacción entre partículas y del modelo de poro tipo canal o rendija que emula el comportamiento de una pared de material sólido.

La función matemática que describe la interacción sólido-fluido se denomina  $V(z)$  y, en el contexto de sistemas fluido - sólido, suele representarse mediante el potencial de Steele 10-4-3[1]. Este potencial describe la fuerza de la interacción entre la superficie sólida y el fluido de interés. En su formulación, el potencial de Steele considera varios factores, como la densidad molecular del sólido, el espaciado entre las capas del material sólido, y los parámetros de interacción entre el fluido y el

sólido. Por ejemplo, al adsorber un fluido en un material compuesto de carbón, como el carbón activado, se utilizan parámetros específicos reportados en la literatura para describir la interacción entre el fluido y la superficie carbonácea. Estos parámetros se ajustan para reflejar con precisión cómo el fluido interactúa con la superficie sólida, tomando en cuenta la estructura y propiedades del material. De esta manera, toda la información relacionada con el tipo de material se puede incorporar dentro de la expresión  $V(z)$  permitiendo modelar superficies complejas y de alto interés como los sólidos nanoestructurados. Entre estos materiales destacan los MOFs, que presentan estructuras porosas y áreas superficiales elevadas, facilitando la adsorción de fluidos. Al ajustar  $V(z)$  según las propiedades específicas de estos materiales, se pueden describir de manera precisa sus interacciones con los fluidos, proporcionando una herramienta poderosa para la investigación y diseño de nuevos adsorbentes con aplicaciones múltiples.

#### 4. Teoría clásica de funcionales de la densidad, DFT

Nuestro sistema de estudio se compone de un fluido cuyas moléculas interactúan entre sí y están confinadas en una pared sólida de un material poroso, con el cual el fluido también interactúa. Para describir el comportamiento del fluido dentro del poro, se emplea la DFT. Este método permite determinar el perfil de densidad ( $\rho(r)$ ) del fluido en el poro, es decir, cómo varía la densidad en función de una coordenada espacial, utilizando expresiones analíticas para la energía libre de Helmholtz ( $F[\rho(r)]$ ). La energía libre de Helmholtz incluye contribuciones energéticas que permiten describir la interacción entre las moléculas del fluido, abarcando

desde modelos simples, como el gas ideal, hasta fluidos complejos como el agua o alcoholes de alto peso molecular. El método consiste en minimizar una función denominada gran potencial ( $\Omega$ ), que se obtiene a partir de las expresiones analíticas para la energía libre de Helmholtz y el potencial sólido-fluido ( $V(z)$ ). La relación entre el potencial termodinámico y la energía libre de Helmholtz está dada por la siguiente ecuación,

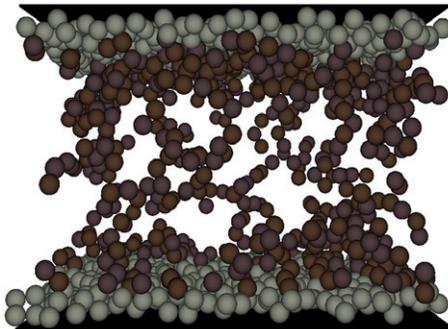
$$\Omega[\rho(r)] = F[\rho(r)] + \int d r [V(z) - \mu] \rho(r), \quad (1)$$

donde  $\mu$  es el potencial químico del fluido. Dentro de la DFT la energía libre de Helmholtz  $F[\rho(r)]$  se puede dividir múltiples contribuciones, tal como,

$$F[\rho(r)] = F_{id}[\rho(r)] + F_{hs}[\rho(r)] + F_{att}[\rho(r)] + F_{assoc}[\rho(r)] + F_{chain}[\rho(r)], \quad (2)$$

donde cada uno de los términos en la energía libre de Helmholtz  $F[\rho(r)]$  representa contribuciones específicas: ideal ( $F_{id}[\rho(r)]$ ), repulsivas de corto alcance ( $F_{hs}[\rho(r)]$ ), atractivas de largo alcance ( $F_{att}[\rho(r)]$ ), de tipo cadena ( $F_{chain}[\rho(r)]$ ), y de asociaciones ( $F_{assoc}[\rho(r)]$ ). Cada una de estas contribuciones permite una descripción detallada del tipo de fluido de interés. Por ejemplo,

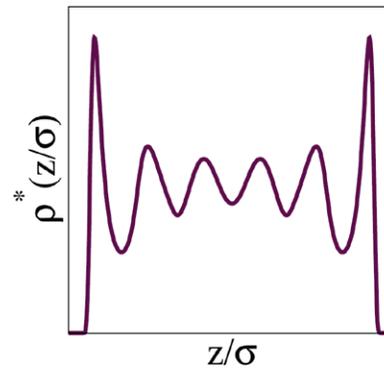
a



para estudiar un fluido a bajas presiones y altas temperaturas donde las interacciones entre partículas son muy débiles, podemos considerar únicamente la contribución ideal. En cambio, para un fluido complejo como un alcohol de cadena larga, es necesario incluir contribuciones adicionales, como las debidas a asociaciones por enlaces de hidrógeno y interacciones tipo Van der Waals entre las cadenas largas del alcohol. Al resolver la ecuación para el potencial termodinámico dada por la Ec. (1), se obtiene el perfil de densidad del fluido de estudio dentro del poro usando la DFT [2,3].

En la Fig. 2a se muestra un ejemplo de partículas adsorbidas en una superficie sólida y cómo éstas se caracterizan mediante un perfil de densidad. Las partículas adsorbidas en la pared están representadas en color gris, mientras que las partículas en el bulto, que se acumulan en el centro del sistema, se muestran en color café oscuro. Estas partículas en el bulto se comportan como un fluido libre, mientras que las adsorbidas están influenciadas directamente por la superficie sólida. En la Fig. 2b, se presenta el perfil de densidad obtenido al resolver la Ec. (1) para un sistema de partículas adsorbidas en una superficie sólida. Este perfil muestra cómo varía la

b



**Fig. 2.** Panel (a): Ejemplo de partículas adsorbidas en una superficie sólida. Panel (b): Perfil de densidad para un sistema de partículas adsorbidas sobre una superficie sólida.

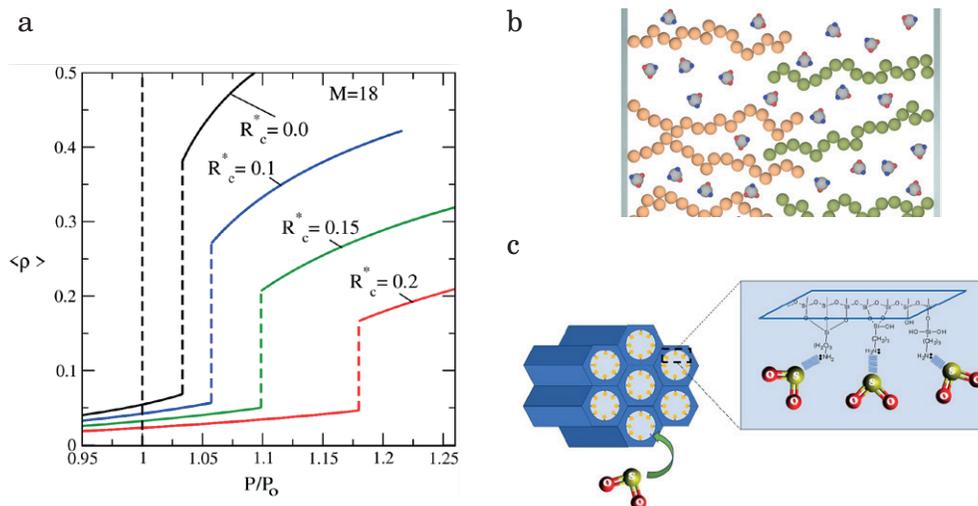
densidad de las partículas en función de la distancia perpendicular a la superficie sólida. La figura ilustra la distribución de las partículas, diferenciando claramente entre aquellas adsorbidas en la superficie y las que se encuentran en el bulto, proporcionando una visualización clara del comportamiento del fluido en contacto con la superficie. A partir de este perfil de densidad, se pueden determinar diversas propiedades del fluido confinado, tales como la cantidad de fluido adsorbido en la pared del material (adsorción), propiedades termodinámicas como la presión, y fenómenos específicos como la condensación o evaporación capilar, es decir, el cambio de vapor a líquido o de líquido a vapor sobre la superficie del sólido, respectivamente.

### 5. Adsorción en paredes modificadas empleando DFT

La cuantificación y el comportamiento de la adsorción de un fluido en un material se estudian a una temperatura fija, variando la presión y observando cómo cambia la cantidad de fluido adsorbido. Estos resultados se representan en una figura denominada isoterma de adsorción. La DFT permite predecir estas isotermas de adsorción de fluidos en materiales complejos con gran precisión, facilitando la comparación con datos experimentales disponibles en la literatura. Uno de los retos más importantes al utilizar la DFT para predecir isotermas de adsorción es desarrollar modelos de fluidos que sean realistas y, al mismo tiempo, computacionalmente eficientes. Estos modelos deben permitir el análisis de fenómenos de adsorción en superficies modificadas químicamente, por ejemplo, superficies recubiertas con cadenas poliméricas unidas a las paredes sólidas del material, que pueden tener terminaciones polares o apolares. En la Fig.

3a, se muestra cómo la cantidad de fluido adsorbido en la pared ( $\langle\rho\rangle$ ) cambia con respecto a la presión reducida ( $P/P_0$ ), siendo  $P_0$  la presión de saturación del sistema. En este panel se observa claramente cómo la densidad de cadenas poliméricas adheridas al material ( $R_c$ ) modifica considerablemente la adsorción en un sistema que tiene cadenas adheridas a la superficie sólida ( $M=18$ ), es decir, cadenas conformadas por dieciocho unidades del mismo diámetro de la molécula de estudio. En la Fig. 3b, se ejemplifica cómo las cadenas poliméricas unidas a la pared del material interactúan con el fluido de interés y cómo estas pueden ser diferentes en cada extremo de la pared, con terminaciones polares, extendidas o sin extender. En la Fig. 3c se muestra cómo la modificación química de un material con cadenas que tienen terminaciones polares aumenta la adsorción del dióxido de azufre en el material [4]. En estos casos, la DFT proporciona una herramienta robusta para modelar estos sistemas y predecir el comportamiento de adsorción bajo diferentes condiciones y modificaciones superficiales.

Los materiales modificados con cadenas poliméricas son de gran relevancia en la actualidad y se pueden modelar con éxito utilizando la DFT. La funcionalización de estos materiales mediante cadenas adheridas al material adsorbente mejora significativamente la adsorción. La funcionalización permite generar una infinita cantidad de configuraciones en los materiales, como es el caso de las MOFs, posibilitando la adsorción selectiva de fluidos específicos de interés. Estos avances en la funcionalización y el modelado empleando la teoría clásica DFT han sido logrados en los últimos años, demostrando su efectividad y potencial en la mejo-



**Fig. 3.** Panel (a): Isotherma de adsorción de agua en una pared modificada con cadenas poliméricas. Aquí se observa cómo la cantidad de fluido adsorbido en la pared ( $\langle \rho \rangle$ ) cambia con respecto a la presión reducida  $P/P_0$ . La densidad de las cadenas poliméricas adheridas al material ( $R_c$ ) modifica significativamente la adsorción. Panel (b): Ejemplo de cómo las cadenas poliméricas unidas a la pared del material interactúan con el fluido de interés. Se ilustra cómo estas cadenas, que pueden tener terminaciones polares o apolares, interactúan con el fluido y afectan su distribución en la superficie. Panel (c): Sistema de adsorción donde se adsorbe dióxido de azufre ( $SO_2$ ) en un material complejo denominado APTE. Las paredes del material APTE han sido modificadas químicamente mediante la introducción de cadenas poliméricas con terminaciones polares. Esta modificación mejora la afinidad del material por el  $SO_2$ , promoviendo una mayor capacidad de adsorción [4].

ra de la adsorción [5,6,7]. Aunque se ha avanzado considerablemente, estos desarrollos marcan solo el comienzo de un amplio rango de aplicaciones posibles en este campo. Aún quedan muchas oportunidades por explorar en la utilización de DFT para el diseño y optimización de materiales modificados para aplicaciones específicas en adsorción.

## 6. Conclusiones y perspectivas

A lo largo de este trabajo se ha revisado los aspectos básicos de la DFT. El estudio de la adsorción de fluidos mediante la DFT permite explorar fenómenos más complejos como el mojado en superficies y la condensación capilar en superficies modificadas, facilitando el diseño de ma-

teriales “inteligentes” con propiedades controladas por estímulos externos [8,9]. Dentro de las perspectivas a futuro en el uso de DFT se incluye la descripción de la adsorción de fluidos puros y mezclas de fluidos complejos como agua, dióxido de azufre e hidrógeno en materiales adsorbentes sólidos de gran interés, particularmente los sólidos nanoestructurados como los MOFs. Otra línea de investigación futura es la adsorción de fluidos en superficies con heterogeneidad energética y corrugación geométrica en las paredes del material adsorbente. Finalmente, el uso de DFT en estos sistemas representa una de las grandes perspectivas para nuestro grupo de investigación en el Área de Fisicoquímica de Superficies de la

UAM - Unidad Iztapalapa. Estos desarrollos abrirán nuevas vías para el diseño y optimización de materiales adsorbentes con aplicaciones en diversas áreas de la ciencia y la ingeniería.

### Agradecimientos

Agradezco al Dr. Orest Pizio por las extensas discusiones para llevar a buen término este trabajo. También agradezco al Departamento de Química de la UAM - Unidad Iztapalapa y al grupo de investigación del Área de Fisicoquímica de Superficies. Finalmente, agradezco al proyecto de investigación de la “Convocatoria Ciencia Básica y de Frontera 2023-2024”, CBF2023-2024-2725.

### Referencias

[1] Steele W., *The Interaction of Gases with Solid Surfaces*, Pergamon Press, Oxford, 1974. ISBN: 9780080177243, 0080177247

[2] Mi J., Tang Y., Zhong C., Li Y.-G., Prediction of phase behavior of nanoconfined Lennard-Jones fluids with density functional theory based on the first-order mean spherical approximation, *J. Chem. Phys.* 124, pp. 144709(1)-144709(7), 2006. DOI: 10.1063/1.2191490

[3] Tang Y., First-order mean-spherical approximation for interfacial phenomena: A unified method from bulk-phase equilibria study, *J. Chem. Phys.* 123, pp. 204704(1)-204704(7), 2005. DOI: 10.1063/1.2121707

[4] Obeso J. L., López-Cervantes V. B., Flores C. V, García Carvajal C., Garduño-Albino C. E., Peralta R. A., Trejos V. M., Huerta L., Ibarra I. A., Solis-Ibarra D., Cordero-Sánchez S., Portillo-Vélez N. S.,

Esparza Shulz J. M., APTES functionalization in SBA-15: effect on SO<sub>2</sub> capture and detection applications, *Dalton Transactions*, 1, 1-10, 2024. DOI: /10.1039/D4DT01283F

[5] Trejos V., Pizio O., Sokołowski S., Adsorption and phase behavior of water-like fluid models with square-well attraction and site-site association in slit-like pores: Density functional approach, *J. Chem. Phys.*, 149, pp. 134701(1)-134701(14), 2018. DOI: 10.1063/1.5047018

[6] Trejos V., Pizio O., Sokołowski S., On the theoretical description of the liquid-vapor coexistence of water-like models with square-well attraction and site-site chemical association, *Fluid Phase Equilib.* 473, pp. 145-153, 2018. DOI: 10.1016/j.fluid.2018.06.005

[7] Trejos V., Sokołowski S., Pizio O., On the phase behavior of model fluids with square-well attraction in slit-like pores. Density functional approach, *Fluid Phase Equilibria*, 483 pp. 92-100, 2019. DOI: 10.1016/j.fluid.2018.11.005

[8] Trejos V., Pizio O., Sokołowski S., On the interdigitation of molecular brushes and solvation force upon adsorption of water in slit-like pores with grafted chains. Density functional approach, *J. Chem. Phys.* 151, pp. 064704(1)-064704(13), 2019. DOI: 10.1063/1.5116128

[9] Trejos V., Aguilar M., Sokołowski S., Pizio O., Towards the description of water adsorption in slit-like nanochannels with grafted molecular brushes. Density functional theory, *Cond. Matt. Phys.* 23, pp. 23604(1)-23604(17), 2020. DOI: 10.5488/CMP.23.23604.