

Estudio computacional del efecto de las interacciones líquido/superficie en procesos difusivos de alcanos confinados en mesoporos de sílica

- Ignacio José Chevallier-Boutell,^{1,2} Gustavo Alberto Monti,^{1,2} Rodolfo Héctor Acosta,^{1,2} Jimena Anahí Olmos-Asar,^{3,4} María Belén Franzoni^{1,2}

¹Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC

²Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba

³Instituto de Investigaciones Físico-Químicas de Córdoba, CONICET-UNC

⁴Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.

En la actualidad existe gran interés científico y tecnológico en caracterizar sistemas mesoporosos de sílica, cuyas aplicaciones van desde soportes para catálisis heterogénea y materiales de empaquetamiento para procesos de separación hasta vehiculización de drogas, macromoléculas o incluso células. Las aplicaciones mencionadas requieren, entre otras cosas, del conocimiento del transporte molecular dentro de las estructuras porosas, siendo la difusión una de las propiedades más relevantes.

El confinamiento de líquidos dentro de materiales modifica propiedades observables tales como la relajación de espín y la difusión efectiva, lo cual resulta muy beneficioso para caracterizar la morfología del sistema poroso de manera no invasiva, por ejemplo, a través de experimentos de Resonancia Magnética Nuclear.

Debido a su hidrofobicidad, los alcanos son muy utilizados como sonda para medir tortuosidades geométricas de matrices polares ya que suponen una interacción nula con la superficie [1]. En este trabajo, los resultados de cálculos *ab initio* muestran una interacción no despreciable de los alcanos, sean cíclicos o lineales, con la pared de mesoporos de sílica [2]. Además, se observa dependencia de la energía de adsorción con la longitud y la forma moleculares. Para estudiar cómo el confinamiento afecta la difusión, se propone un modelo geométrico que, junto al cálculo de energías de adsorción, nos permite determinar una energía de adsorción pesada por la fracción de moléculas que reside cerca de la pared del poro. De esta manera, se pudo establecer la dependencia entre la energía pesada y el diámetro del poro, observándose cómo ésta correlaciona con los coeficientes de difusión restringida obtenidos previamente en experimentos de RMN [3]. Concluimos que la determinación de la tortuosidad geométrica del sistema a través de los experimentos de RMN no es precisa para poros cuyos diámetros sean menores que los 6 nm, aproximadamente.

Referencias:

[1] D'Agostino C. *et al.*, Phys. Chem. C, **116**, 8975 (2012).

[2] Chevallier-Boutell IJ *et al.*, Microporous and Mesoporous Mater. (2021). DOI

[3] Garro Linck L *et al.*, Microporous and Mesoporous Mater. **305**, 110351 (2020).