



# VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

## Porosidad inducida en un líquido poroso

Fonrouge, Sergio<sup>1,2</sup>, Borioni, José L.<sup>3</sup>, Crawford, Deborah<sup>4</sup>, James, Stuart L.<sup>4</sup>, Del Pópolo, Mario G.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas, CONICET, Mendoza; <sup>2</sup> Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza; <sup>3</sup> Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba; <sup>4</sup> School of Chemistry and Chemical Engineering, Queen's University Belfast, Belfast  
sergio.fonrouge@gmail.com

Los Líquidos Porosos (LP) son una nueva clase de materiales que se distinguen de los líquidos convencionales por la presencia de cavidades permanentes y bien definidas (Giri, 2015). Estas cavidades, que forman parte de su estructura molecular, permiten la captación de solutos pequeños y tienen potenciales aplicaciones en procesos de absorción y separación de gases y de catálisis.

Un prototipo de LP estudiado en la actualidad es la variante de Tipo II formada por hospedadores pillar[5]arene disueltos en éter 15-corona-5. Simulaciones con técnicas de Dinámica Molecular (DM) y *Umbrella Sampling* (Torrie, 1977) basados en datos experimentales indican que este líquido cumple con las características de un LP viable: el hospedador no formó complejos de inclusión con el solvente pero sí lo hizo con el metano, soluto de prueba (Fig. 1). A diferencia de otros LPs estudiados hasta la fecha, se observó el colapso de la cavidad intrínseca del pillar[5]arene debido a la flexibilidad de sus caras (Hughes, 2021). No obstante, la presencia de metano indujo una conformación más estable de las cavidades, hecho que se manifiesta en un aumento de la porosidad relativa (Fig. 2). Tal comportamiento sugiere que la porosidad intrínseca en un LP puede manifestarse de forma dinámica a partir de las interacciones entre los componentes moleculares del sistema.

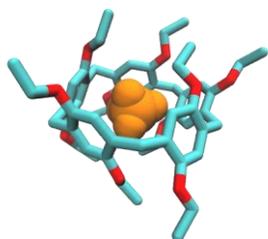


Figura 1: Representación de una molécula de metano dentro de un hospedador pilarareno.

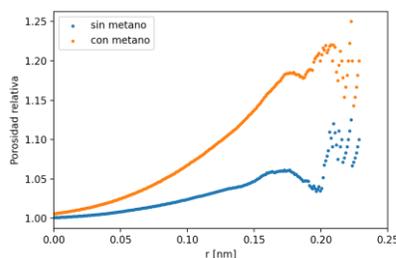


Figura 2: Porosidad relativa (probabilidad de inserción de esferas rígidas de radio  $r$  en el LP respecto del solvente puro; Pohorille, 1990) para LPs simulados por DM a 350 K y 1 atm.

Giri, N., Del Pópolo, M.G., Melaugh, G., Greenway, R. L., Rätzke, K., Koschine, T., Pison, L., Costa Gomes, M.F., Cooper, A.I., James, S.L., *Nature*, **2015**, 7577, 216-220.  
Torrie, G.M, Valleau, J.P., *Journal of Computational Physics*, **1977**, 2, 187-199.  
Hughes, A.R., Liu, M., Paul, S., Cooper, A.I., Blanc, F., *J. Phys. Chem. C*, **2021**, 24, 13370–13381.  
Pohorille, A., Pratt, L.R., *J. Am. Chem. Soc.*, **1990**, 13, 5066-5074.