



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

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

Chevallier-Boutell I J^{1,2}, Monti G A^{1,2}, Acosta R H^{1,2}, Olmos-Asar J A^{3,4}, Franzoni M B^{1,2}

¹ Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Córdoba, Argentina. ² CONICET, Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG), Córdoba, Argentina. ³ Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas - Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina. ⁴ Instituto de Investigaciones en Físico-Química de Córdoba, CONICET-UNC, Córdoba, Argentina
belen.franzoni@unc.edu.ar

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 del líquido 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 entre alcanos, sean cíclicos o lineales, con la pared de mesoporos de sílica [2]. Además, se observa una dependencia de la energía de adsorción tanto con la longitud como con la forma molecular. Se propone un modelo geométrico que junto al cálculo de energías de adsorción permite determinar una energía de adsorción pesada por la fracción de moléculas que reside cerca de la pared del poro relativa a la fracción de moléculas en el bulk. De esta manera se pudo establecer la dependencia entre la energía pesada y el diámetro del poro, observándose una correlación 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 menos que los 6 nm, aproximadamente.

[1] D'Agostino C., *et al.*, J. Phys. Chem. C, **2012**, 116 (16) 8975–8982. [2] Chevallier-Boutell I.J., *et al.*, Microporous and Mesoporous Mater. **2021**, <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2021.111315>. [3] Garro Linck L., *et al.*, Microporous and Mesoporous Mater. **2020**, 305, 110351.

