



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

Dinámica de líquidos confinados en sistemas porosos. Estudios por RMN en el dominio temporal

Rodolfo H. Acosta

FAMAF-Universidad Nacional de Córdoba and IFEG-CONICET

E-mail: r.acosta@unc.edu.ar

Los materiales porosos se encuentran en una gran variedad de sistemas en la naturaleza y en aplicaciones tecnológicas. El éxito en cualquier aplicación depende del transporte molecular dentro de la matriz porosa, es por ello que el conocimiento de la dinámica de un fluido embebido en un medio poroso es de central importancia. Entre los diversos aspectos a ser tenidos en cuenta se encuentran el tamaño de poro, su interconectividad y la interacción líquido-superficie como las principales características que dominan la dinámica del fluido. La resonancia magnética nuclear en el dominio temporal (TD-RMN) es considerada a la fecha como una herramienta indispensable para el estudio de medios porosos en diversas áreas tales como el estudio de yacimientos de hidrocarburos, estudios de suelo, materiales, aplicaciones clínicas entre otros. En el estudio de la dinámica de fluidos en sistemas porosos prevalecen las mediciones del coeficiente de autodifusión y las medidas de relajación. En esta presentación se dará un resumen de las técnicas involucradas [1] y algunos ejemplos obtenidos en el grupo de RMN de Córdoba, tales como la determinación de capas de hidratación en mesoporos de matrices de TiO_2 con poros del orden de 5 nm [2] y la cinética de liberación de iones litios confinados en mesoporos de SiO_2 con tamaños de poro entre 3 - 30 nm [3]. Se mostrará también la determinación de coeficientes de difusión de agua adsorbida en Metalic Organic Frameworks (MOFs) funcionalizados con polímeros, como indicador del balance hidrofílico-hidrofóbico de materiales híbridos [4].

1. Linck, L. G. *et al.* Limits imposed by liquid/surface interactions in the determination of tortuosity in mesopores. *Microporous Mesoporous Mater.* **305**, 110351 (2020).
2. Velasco, M. I. *et al.* Water Confined in Mesoporous TiO_2 Aerosols: Insights from NMR Experiments and Molecular Dynamics Simulations. *J. Phys. Chem. C* **121**, 7533–7541 (2017).
3. Martínez Casillas, D. C. *et al.* Diffusion of Water and Electrolytes in Mesoporous Silica with a Wide Range of Pore Sizes. *J. Phys. Chem. C* **122**, 3638–3647 (2018).
4. Velasco, M. I., Acosta, R. H., Marmisollé, W. A., Azzaroni, O. & Rafti, M. Modulation of Hydrophilic/Hydrophobic Character of Porous Environments in Metal-Organic Frameworks via Direct Polymer Capping Probed by NMR Diffusion Measurements. *J. Phys. Chem. C* **123**, (2019).