

**Viernes 29 de noviembre, 10 hs.**

Aula Fernández Prini INQUIMAE-DQIAQF

Ciudad Universitaria Pab. II, 3º Piso

**Estudio de transiciones de fase y transporte en soluciones acuosas mesoconfinadas**

***Tesis doctoral***

IVETTE JOHANNA ANGARITA VILLAMIZAR

**Directora:** Dra. Maria Paula Longinotti

**Consejero de Estudios:** Dr. Mario Tagliazucchi

**Jurados:** Dr. Patricio R. Santagapita - Prof. Adj., DQO, FCEN, UBA - Inv. Indep., CHIDECAR, CONICET, Dra. Sara A. D. Aldabe - Prof. Tit., DQIAQF, FCEN, UBA - Inv. Sup. ad-honorem, INQUIMAE, CONICET y Dr. Laureano M. Alarcón - Asis. de Docencia, UNS - Inv. Adj., INQUISUR, CCT, Bahía Blanca.

Resumen

El estudio del efecto del confinamiento en la nanoescala en las propiedades de transporte y equilibrio de fases es de sumo interés básico y práctico para áreas como almacenamiento de energía, adsorción de contaminantes, entre otros. Asimismo, el confinamiento de agua en poros de tamaño nanométrico se ha utilizado para estudiar el agua en la zona sobreenfriada, conocida como "Tierra de nadie", ya que de esta manera puede evitarse su cristalización por debajo de la temperatura de nucleación homogénea. También, es sabido que el agregado de polioles al agua puede utilizarse para evitar la cristalización de la misma.

En este trabajo de tesis, se analizó, desde un punto de vista básico, el efecto del confinamiento en la nanoescala, sobre las propiedades de transporte de electrolitos y moléculas, así como también el efecto del confinamiento en la transición de fase sólido-líquido y en la transición vítrea de soluciones acuosas de polioles.

Como mezclas confinadas se eligieron mezclas glicerol-agua y tetraetilenglicol-agua, las cuales se confinaron en silica mesoporosa con tamaño de poro de entre 2 y 58 nm.

Los estudios de transiciones de fase se realizaron a partir de medidas calorimétricas y los estudios de difusión a partir del análisis de la liberación de soluto del medio poroso a una solución bulk, los cuales fueron complementados con medidas de autodifusión de RMN.

Los resultados muestran que el confinamiento disminuye la temperatura de transición vítrea en mezclas poliol-agua, evidenciando el efecto de las restricciones geométricas en los movimientos cooperativos de las soluciones. En las mezclas tetraetilenglicol-agua pudo estimarse el tamaño de las regiones de rearrreglos cooperativos, obteniéndose un valor en el orden o por debajo de los 2 nm. Asimismo, en estas mezclas observamos indicios de la cristalización de hielo, discutiéndose una hipótesis previa en la literatura donde se discute la visualización de dos fases del agua de distinta densidad.

Las medidas de transporte muestran un efecto significativo en la movilidad de los electrolitos en poros por debajo de los 6 nm, dependiendo notablemente la difusión de la composición de poliol en la solución. Esto fue analizado considerando que dos poblaciones de H de distinta movilidad dentro de los poros.