

Viernes 9 de agosto, 11 hs.

Aula Fernández Prini INQUIMAE-DQIAQF

Ciudad Universitaria Pab. II, 3º Piso

Propiedades fisicoquímicas en sistemas confinados

Tesis doctoral

SOLANA MAGALI DI PINO

Directora: Dra. Verónica Sánchez

Consejero de Estudios: Dr. Mariano González Lebrero

Jurados: Dres. Mario Tagliazucchi - - Prof. Adj., DQIAQF, FCEN, UBA - Inv. indep., INQUIMAE, CONICET, Javier Rodríguez - - Prof. Asoc., UNSAM - Inv. Indep., Gerencia de Área Seguridad Nuclear y Ambiente. Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CAC, CNEA, CONICET y Rocío Semino - - Prof. Asoc., Univ. Sorbona, Francia

Resumen:

Los sistemas confinados son de amplio interés debido a su capacidad de modificar las propiedades termodinámicas, cinéticas y de transporte en diversas reacciones y fenómenos químicos.

En el presente trabajo de tesis se estudiaron propiedades de transporte y propiedades termodinámica de sistemas confinados comprendiendo diferentes estados de agregación por medio de métodos computacionales.

En primer lugar, se estudiaron sistemas gaseosos y su transporte a través de materiales porosos de carbono. Se pudo determinar el efecto de la tortuosidad y la rugosidad en la difusión de gases no polares, así como en la capacidad separadora de mezclas de los mismos.

En segundo lugar, se estudió el efecto del tamaño del sistema en agregados moleculares de agua en la energía de autodisociación de la misma. Pudiéndose determinar la importancia de los puentes de hidrógeno que estabilizan a los productos de la reacción.

Por último, se desarrolló y aplicó un protocolo de aprendizaje no supervisado para el estudio de sistemas químicos, específicamente, de la estructura del protón en exceso en soluciones ácidas. Se concluyó que la estructura no está bien definida por configuraciones límite (Eigen o Zundel), sino que se constituye como un defecto altamente fluctuante.

Adicionalmente, esta metodología fue posteriormente utilizada para el estudio de la estructura molecular de solventes *Water-in-Salt* (WiS).