

Simulación computacional de fluidos nanoporosos.

Computer simulation of nanoporous fluids.

Director: DEL POPOLO, Mario Gabriel

Correo Electrónico: mdelpopolo@gmail.com

Co-Director: -

Integrantes: MELAUGH, Gavin; JAMES, Stuart Lloyd; HARDACRE, Christopher; FERNANDEZ GAUNA, María Cecilia.

Palabras Clave: *Materia condensada blanda, líquidos complejos, materiales porosos, simulaciones computacionales*

Resumen Técnico: *La porosidad es una propiedad normalmente asociada a materiales sólidos que tiene gran relevancia en química de materiales. El presente proyecto lleva el concepto de material nanoporoso a un nuevo terreno, ya que nuestro objetivo es diseñar, sintetizar y caracterizar líquidos con poros permanentes, de tamaño, forma y polaridad controlables. Nuestra propuesta se base en la idea de que es posible generar cavidades en un fluido, si estas se introducen como parte intrínseca de la estructura molecular. Nos referimos a estos sistemas como "líquidos porosos" (LPs), ya que sus componentes microscópicos son moléculas o nanopartículas huecas recubiertas con sustituyentes orgánicos flexibles (cadena carbonadas, oligómeros, etc), cuya función es mantener al sistema en estado líquido. Una condición deseable que deben satisfacer los LPs es que los poros sean accesibles a moléculas huéspedes, lo que potenciaría su aplicabilidad en catálisis homogénea y en sistemas de captura y almacenamiento de gases. El proyecto involucra a investigadores Argentinos y del Reino Unido, y se basa en una combinación de simulaciones multiescala y experimentos de síntesis y caracterización físico-química. La estrategia computacional se basa en una combinación de técnicas de simulación complementarias que son empleadas de manera jerárquica. Durante el curso del proyecto se desarrollarán modelos matemáticos, algoritmos y códigos de simulación, que se usarán para predecir el comportamiento de los LPs en términos de su arquitectura molecular. De esta manera se establecerán patrones de diseño, tendientes a maximizar la fluidez y porosidad del material, que guiarán el trabajo de síntesis. Las simulaciones proveerán información fundamental sobre el comportamiento físico de esta nueva familia de materiales, y asistirán en la interpretación de experimentos de difracción de neutrones, adsorción de gases y medidas calorimétricas, que serán llevadas a cabo por el grupo de colaboradores extranjeros. La descripción de los LPs a escala atómica/molecular se hará en base a cálculos de estructura electrónica y simulaciones de Dinámica Molecular y de Monte Carlo. Se investigará: 1)La termodinámica, fluidez y estructura de la fase líquida, en este último caso a través del cálculo de espectros de difracción de neutrones; 2)El grado de porosidad de los LPs (fracción de cavidades accesible de un cierto tamaño) y su dependencia con la temperatura; 3)Su capacidad de adsorber/disolver moléculas simples (H₂, N₂, CO₂, etc); 4)La actividad catalítica de las moléculas huecas, a través del estudio de la dinámica de*



reacciones químicas que involucren a sustratos hospedados en la cavidad intramolecular. En la última etapa del proyecto se desarrollará un modelo mecánico-estadístico, basado en la teoría clásica del funcional de la densidad, que permitirá calcular el diagrama de fases para un modelo genérico de líquido poroso, e investigar su comportamiento dinámico a tiempos largos (reología).

Keywords: *Soft-condensed matter, complex fluids, porous materials, computer simulations*

Summary: *In this project we seek to demonstrate a fundamentally new concept – that permanent porosity can exist in liquids, as well as in solids. We will therefore prepare and characterize the first examples of an entirely new class of materials, "porous liquids", that is liquids which contain permanent, microscopic cavities. Due to their unique combination of porosity and fluidity, these new materials have the potential for beneficial applications in the longer term in such as the safe and convenient storage of gases such as hydrogen in clean fuel applications, in new types of efficient chemical purifications, or as selective barriers (liquid molecular sieves). They may have distinct advantages over porous solids in such aspects as the speed with which other chemical substances can be absorbed and released. In order to achieve our aim we will resort to a combination of computer simulations, chemical synthesis, neutron diffraction experiments and gas adsorption measurements. The proposal focusses on the computational part of the project, which is based on a multiscale approach where different techniques are used in a complementary manner and allow the description of the system over multiple time and length scales. Simulations will not only assist in the interpretation of experimental measurements, but will also provide design patterns for synthesizing new porous liquids.*