

Uso de sondas fluorescentes para estudiar mecanismos de transporte molecular en TiO_2 mesoporoso: Sulforodamina B vs. Rodamina 6G

Zambrano García, Iskra¹; Hodak, José²; González Solveyra, Estefanía¹; Soler Illia, Galo¹

¹ Instituto de Nanosistemas, Universidad Nacional de San Martín, Prov. de Buenos Aires, Argentina.

² Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Argentina.

iskrazambrano@gmail.com

Área temática: D. Fenómenos de Superficies

Comprender el transporte molecular bajo confinamiento a nanoescala es esencial para aplicaciones que abarcan desde la detección hasta la catálisis. En este trabajo, investigamos el comportamiento de transporte de sondas fluorescentes dentro de películas mesoporosas de TiO_2 . Se consideraron dos sondas: Sulforodamina B (SRB), una molécula con carga negativa, y rodamina 6G (R6G), que presenta carácter tanto catiónico como neutro e hidrofóbico. Esta combinación permite un análisis comparativo de diferentes regímenes de interacción dentro de la misma matriz porosa.

El estudio combina enfoques experimentales y computacionales para proporcionar una descripción completa del transporte molecular. Experimentalmente, se emplearon técnicas de fluorescencia para estudiar la dinámica de difusión dentro de los poros. Las mediciones se realizan bajo diferentes condiciones de pH y fuerza iónica, lo que permite ajustar sistemáticamente la carga superficial del TiO_2 y, por consiguiente, el entorno electrostático al que se exponen las sondas. Se utilizó un modelo teórico-computacional complementario para estimar las propiedades moleculares de la superficie de los poros y la distribución molecular de las diferentes especie dentro de los mismos.

De los experimentos surge que las moléculas de SRB y de R6G no muestran una difusión convencional en 2 dimensiones dentro de los poros. Por el contrario, su movilidad puede describirse mediante un modelo de difusión y adsorción con las paredes de los poros. Esto provoca que mencionadas moléculas tengan una movilidad reducida dentro de los poros, hasta 3 órdenes de magnitud menos en comparación con su comportamiento en solución bulk. Así mismo, los resultados para SRB revelaron una fuerte dependencia de la dinámica de transporte con respecto al confinamiento y las interacciones electrostáticas entre las moléculas y las paredes de los poros. Mientras que, en el caso de la R6G, si bien los efectos electrostáticos siguen contribuyendo, las interacciones hidrofóbicas con la superficie del poro desempeñan un papel significativo, lo que da lugar a comportamientos de transporte un diferentes. Por otra parte, los cálculos computacionales también muestran cómo la organización de las diferentes especies se ve afectada por los grupos titanol presentes en las paredes de los poros.

En resumen, estos hallazgos demuestran que el transporte molecular en películas mesoporosas de TiO_2 se rige por un complejo equilibrio entre interacciones electrostáticas.