

Dinámica de transporte de gas en medios acuosos confinados: Modelado y evaluación electroquímica de capas delgadas de ZIF-8.

Arcidiacono Melina; Néstor Ariel Pérez Chávez; Waldemar Marmisollé; Omar Azzaroni; Alberto Albesa;
Matías Rafti

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas - CONICET - UNLP

arcidiaconomelina@inifta.unlp.edu.ar

Área temática: D. Fenómenos de Superficies

Comprender cómo el nanoconfinamiento afecta el transporte molecular representa un desafío en el estudio de la materia blanda, con implicaciones que abarcan desde los canales iónicos biológicos hasta las membranas para conversión de energía. En este contexto, la optimización de procesos que dependen de reactivos gaseosos en fase líquida se ve comprometida por el desfase entre la cinética de la reacción y la reducida ventana de solubilidad de los gases en medios acuosos. Frente a las estrategias tradicionales de ingeniería de celdas, la integración de redes metal-orgánicas (MOFs) directamente en las interfaces emerge como una vía avanzada para crear reservorios locales que manipulan la concentración de reactivos a escala nanométrica.

Sin embargo, el uso de estos materiales nanoporosos como reservorios revela cierta complejidad: la dependencia no monótona del desempeño respecto al espesor del marco estructural. Estudios experimentales indican que, si bien la microporosidad incrementa la capacidad de almacenamiento, el transporte en sistemas saturados de solvente no es puramente difusivo, sino que sigue modelos de reacción-difusión donde las interacciones entre el soluto y los sitios de unión del marco ralentizan el flujo molecular. Esta competencia crítica entre la capacidad de preconcentración y la cinética de liberación puede verse determinada por el control dimensional de los cristales, donde la reducción del tamaño de partícula minimiza las barreras cinéticas internas.

El aprovechamiento de esta porosidad permanente, concepto validado incluso en fases líquidas microporosas, permite no solo superar los límites termodinámicos de solubilidad, sino también desentrañar los mecanismos de transporte confinado bajo condiciones de alta demanda operativa. Bajo esta premisa, en este trabajo se estudia el control difusional de oxígeno abordando una doble perspectiva: de manera experimental, evaluando el desempeño electroquímico para la reacción de reducción de oxígeno en sustratos de oro modificados con MOFs (ZIF-8), y de manera teórica, mediante simulaciones que permiten caracterizar la dinámica de transporte y preconcentración en la interfaz. Para ello se recurrió a dinámica molecular (LAMMPS) sobre slabs de ZIF-8 de distintos espesores, modelando un sistema asimétrico con agua y oxígeno en el lado feed y solo agua en el lado permeado, lo que permitió cuantificar los coeficientes de difusión y caracterizar el régimen de transporte dominante.