



## AGUA EN NANOPOROS DE TiO<sub>2</sub>: ESTRUCTURA, DINAMICA Y COMPORTAMIENTO DE FASE DE AGUA NANOCONFINADA

E. González Solveyra <sup>(1)\*</sup>, E. De la Llave, <sup>(1)</sup> G. Soler Illia, <sup>(2)</sup> V. Molinero, <sup>(3)</sup> D. Scherlis<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pab. II, C.A.B.A. C1428EHA, Argentina.

<sup>(2)</sup> Gerencia Química, Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, Argentina

<sup>(3)</sup> Department of Chemistry, University of Utah, EE.UU.

\*[esolveyra@qi.fcen.uba.ar](mailto:esolveyra@qi.fcen.uba.ar)

### RESUMEN

*El efecto de las interfaces y el confinamiento sobre el comportamiento del agua es de alta relevancia teórica y tecnológica. Sin embargo, son escasos a la fecha trabajos que estudien las propiedades de agua confinada en poros cilíndricos, donde entran en juego confinamiento, curvatura, cristalinidad de la superficie e interacciones con la misma.*

*Empleando herramientas de dinámica molecular clásica se estudio la estructura, dinámica y comportamiento de fases de agua confinada en canales cilíndricos de TiO<sub>2</sub> cristalino de 1.3, 2.8 y 5.1 nm de diámetro con distinto contenido de agua, empleando el campo de fuerzas derivado por Bandura y colaboradores.<sup>[1]</sup>*

*En todos los sistemas estudiados se observó la formación de una bicapa fuertemente adsorbida cuya movilidad se encuentra sensiblemente reducida respecto al agua bulk. La movilidad traslacional del agua depende fuertemente de la distancia a la superficie de los poros así como también la estructura y dinámica de la red de puentes hidrógeno. Para el sistema más pequeño, el llenado del poro procede sin la formación de una fase líquida dentro del poro. Por otro lado, para los sistemas de 2.8 y 5.1 nm de diámetro se observó la aparición de una fase condensada con  $\rho \sim \rho_{bulk}$  en co-existencia con una fase adsorbida de baja densidad a partir de llenados críticos muy superiores a los observados para sistemas menos hidrofílicos, tales como sílica. La ausencia de la misma en el poro más pequeño se supone una consecuencia de la baja movilidad de la bicapa, que dificulta la nucleación necesaria para la condensación capilar.*

**Palabras clave:** titania, agua, estructura, fases, dinamica

### Referencias

[1] Bandura AV, Kubicki JD., *J Phys Chem B*. 2003.;107(40):11072–81.