

EFFECTOS DE LA GEOMETRÍA EN NANOCANALES MODIFICADOS CON POLIELECTROLITOS DIPRÓTICOS

Facundo Matías Gilles¹, Igal Szleifer² y Omar Azzaroni¹

¹ Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, Diag.113 y Calle 64, c.c.1900, La Plata, Buenos Aires, Argentina.

² Department of Biomedical Engineering and Chemistry of Life Processes Institute, Northwestern University, Evanston, Illinois 60208, EE.UU.
fmgilles@inifta.unlp.edu.ar

PALABRAS CLAVE: Confinamiento, Teoría Molecular, Equilibrio químico

Los nanocanales de estado sólido consisten en orificios que atraviesan una membrana de lado a lado. Típicamente la longitud del nanocanal, 10-12 micrómetros, es órdenes de magnitud más grande que su diámetro (10-300nm). Con esta relación geométrica entre el largo y el diámetro, las propiedades de conductividad iónica estarán gobernadas por los efectos que ocurran en el seno del nanocanal, es decir, pueden despreciarse los efectos de borde. Como el rango de las interacciones electrostáticas en solución es del orden de los diámetros característicos, aparecen efectos relacionados con la carga confinada en el nanocanal. La funcionalización de los nanocanales con polielectrolitos dipróticos, permite aumentar el número máximo de carga confinada y modular la conductividad iónica con el pH de la solución [1].

En este trabajo se ha utilizado la Teoría Molecular (TM) [2] para entender y predecir las propiedades fisicoquímicas de un nanoporo cilíndrico modificado con poly(2-(methacryloyloxy)ethyl-phosphato) (PMEP). Dicha teoría contempla explícitamente los detalles moleculares de los componentes del nanocanal e incorpora las interacciones moleculares y los equilibrios químicos necesarios para describir el comportamiento del PMEP confinado. Uno de los aspectos destacables de la TM es la posibilidad de estimar la conductancia del nanoporo, un observable macroscópico que es medido experimentalmente. El abordaje teórico brinda también, información de las propiedades microscópicas del sistema como por ejemplo: grado de disociación, distribución de polímero y concentración de iones dentro del nanocanal. Todas ellas magnitudes dependientes de la posición radial dentro del nanocanal.

Con el objetivo de explorar otras geometrías se desarrolló un método para extender los resultados de la TM. Se estudió el fenómeno de regulación de carga, que produce un corrimiento y un ensanchamiento de los equilibrios químicos bajo confinamiento y se desarrolló un modelo simplificado que permite entender el corrimiento de los equilibrios químicos con el diámetro del nanocanal y la concentración de sal en solución.

REFERENCIAS.

[1] B. Yameen, M. Ali, R. Neumann, W. Ensinger, W. Knoll, O. Azzaroni, "Proton-regulated rectified ionic transport through solid-state conical nanopores modified with phosphate-bearing polymer brushes", *Chem. Commun. (Camb)*, **46**, **2010**, 1908–1910.

[2] M. Tagliazucchi, O. Azzaroni, I. Szleifer, "Responsive Polymers End-Tethered in Solid-State Nanochannels: When Nanoconfinement Really Matters", *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, **2010**, 12404–12411.