

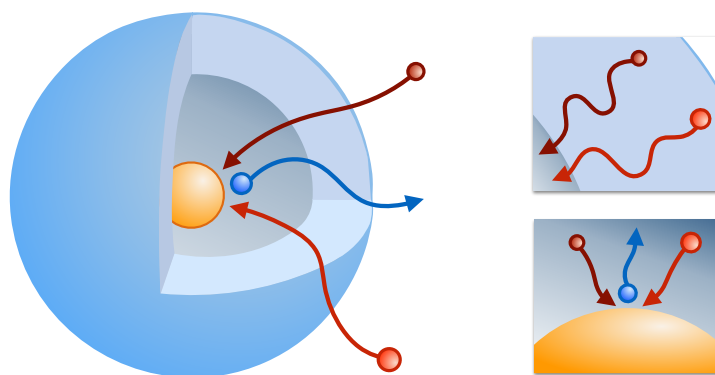
Diseño racional de nanoreactores sensibles a estímulos

Rafael Roa

Soft Matter and Functional Materials, Helmholtz-Zentrum Berlin, Berlin (Germany)

Email: rafael.roa@helmholtz-berlin.de

La catálisis mediante nanopartículas metálicas es uno de los campos de mayor crecimiento en nanociencia [1]. Sin embargo, el control óptimo de la actividad y selectividad catalíticas con nanopartículas sigue siendo un gran desafío científico. En esta charla mostramos cómo obtener reglas de diseño para la optimización de la catálisis con nanopartículas (en medio acuoso) mediante nanoreactores sensibles a estímulos. Dichos nanoreactores consisten en nanopartículas catalíticamente activas encapsuladas en una cubierta polimérica sensible a estímulos. Dicha cubierta no sólo previene la agregación de las nanopartículas, sino que, mediante su permeabilidad, controla la actividad catalítica del proceso [2-5]. Las propiedades físico-químicas de la nanocubierta polimérica (típicamente compuesta de microgeles) hacen que ésta reaccione a estímulos externos, permitiendo así que los flujos de reactantes (y por tanto la velocidad de reacción) puedan ser controlados, por ejemplo, mediante la temperatura, concentración de electrolito, o composición del solvente [2-5]. De esta forma, el novedoso carácter híbrido de los nanoreactores proporciona medios sin precedentes para el control de la nanocatálisis gracias a la aparición de nuevos grados de libertad. Mediante modelado teórico y simulación en múltiples escalas [5-7], ofrecemos una comprensión teórica y principios de diseño racional en sistemas de nanoreactores.



- [1] M. A. C. Stuart *et al.*, *Nat. Mater.* **9**, 101 (2010).
- [2] S. Wu, J. Dzubiella, J. Kaiser, M. Drechsler, X. Guo, M. Ballauff, and Y. Lu, *Angewandte Chemie* **51**, 2229 (2012).
- [3] H. Jia, R. Roa, S. Angioletti-Uberti, K. Henzler, A. Ott, X. Lin, J. Möser, Z. Kochovski, A. Schnegg, J. Dzubiella, M. Ballauff, Y. Lu, *J. Mater. Chem. A* **4**, 9677 (2016).
- [4] S. Angioletti-Uberti, Y. Lu, M. Ballauff, and J. Dzubiella, *J. Phys. Chem. C* **119**, 15723 (2015).
- [5] R. Roa, W. K. Kim, M. Kanduč, J. Dzubiella, and S. Angioletti-Uberti, *ACS Catal.* **7**, 5604 (2017).
- [6] W. K. Kim, A. Moncho-Jordá, R. Roa, M. Kanduč, and J. Dzubiella, *Macromolecules*, **50**, 6227 (2017).
- [7] M. Kanduč, R. Chudoba, K. Palczynski, W. K. Kim, R. Roa, and J. Dzubiella, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 9705 (2017).