

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA TRANSFERENCIA DE MATERIA A TRAVÉS DE UNA INTERFASE LÍQUIDO|LÍQUIDO

L. Johanna Sanchez Vallejo, Ezequiel P.M. Leiva y Sergio A. Dassie

Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba (INFIQC), Departamento de Fisicoquímica - Facultad de Ciencias Químicas - Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, X5000HUA, Córdoba, ARGENTINA. e-mail: jvallejo@fcq.unc.edu.ar

Introducción

El estudio a nivel molecular de las interfaces líquido|líquido y de los procesos de transferencia de carga a través de ellas es fundamental para la comprensión de las propiedades de la interfase y de los diferentes mecanismos de transferencia.^[1] Siendo esta información de gran interés en electroquímica y posibles aplicaciones en nanociencia.^[2] Para lo cual empleamos como herramienta de trabajo simulaciones de dinámica molecular de sistemas bifásicos.

Resultados

Las simulaciones de dinámica molecular se desarrollaron para la interfase líquido|líquido de agua|cloroformo^[3] utilizando los programas *AMBER* y *GROMACS*, en dos ensamblajes diferentes: canónico e isobárico-isotérmico. Se analizaron las propiedades termodinámicas tanto de la interfase formada como del seno de cada líquido que la conforma, para garantizar que el sistema modelado es adecuado. Se llevó a cabo la transferencia de iones monovalentes y un ión divalente a través de la interfase. el dragado del ión se realiza desde el seno de la fase acuosa hasta el solvente orgánico. A partir de estas simulaciones, se calculó el potencial de fuerza media (PFM) para el proceso de transferencia del ión permitiendo obtener el perfil de la energía libre cuando el ion es transferido desde la fase acuosa a la fase orgánica.

Conclusiones

A través del trabajo realizado se puede obtener mayor conocimiento del mecanismo de transferencia de especies cargadas en interfaces líquido|líquido, con un enfoque de análisis principal en la zona interfacial y el cambio de la capa de solvatación de estas especies a medida que son transferidas. En la transferencia de varios iones se observó la conservación total de la primera capa de solvatación a lo largo del todo el dragado del ión a través de la interfase líquido|líquido.

Referencias

- [1] R.A. Iglesias, S.A. Dassie, Ion Transfer at Liquid/Liquid Interfaces, Nova Publishers, New York, 2010.
- [2] L.J. Sanchez Vallejo, J.M. Ovejero, R.A. Fernández, S.A. Dassie, International Journal of Electrochemistry (2012) in press.
- [3] D. K. Hore, D. S. Walker, L. MacKinnon, and G. L. Richmond, Journal of Physical Chemistry C, vol. 111, no. 25, pp. 8832–8842, 2007.