

Estructura molecular de la interfase entre Líquidos Iónicos Inmiscibles

Nora A. E. Moyano*[†], Joaquín Klug*, Daniel Millán[^] y Mario G. Del Pópolo*.

*CONICET y Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UNCuyo, Mendoza 5500, Argentina.

[^]CONICET y Facultad de Ciencias Aplicadas a la Industria, UNCuyo, San Rafael 5600, Argentina.

[†]nmoyano@mendoza-conicet.gob.ar

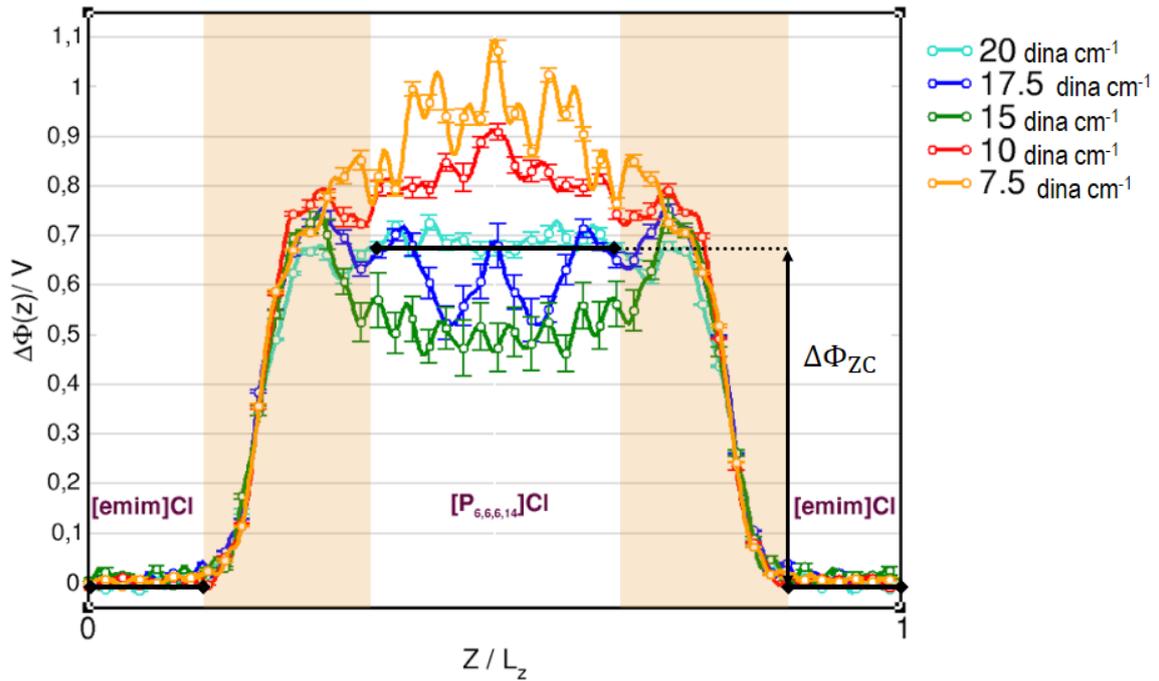
RESUMEN

La inmiscibilidad entre dos Líquidos Iónicos se presenta en ciertas mezclas que poseen diferencias notables en algunas de sus estructuras constituyentes (el anión o el catión). A partir de su descubrimiento en el 2006 se pensó en aplicarlos en separaciones líquido-líquido. Puesto que las dos fases no son miscibles, las reacciones o extracciones en sistemas bifásicos de LI inmiscibles (LII) ocurren en la interfase. La interfase entre dos LII, ofrece, además, la posibilidad de explorar fenómenos de electrocapilaridad en sistemas en los que la distribución de carga eléctrica muestra desviaciones significativas con respecto a lo observado en interfases entre soluciones electrolíticas. Con el fin de maximizar el rendimiento y el diseño de procesos donde se puedan aplicar las interfases entre LII, los principales factores que deben investigarse son la estructura y la dinámica de la interfase.

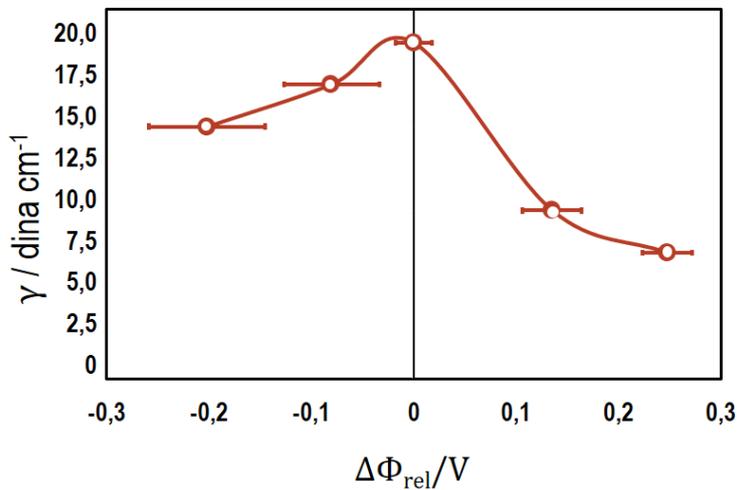
Actualmente, se conoce muy poco sobre la estructura molecular de las interfases entre LII, y no se dispone de modelos que describan la relación entre la tensión superficial y la diferencia de potencial electrostático en la interfase.

En esta charla se expondrán los aspectos más relevantes del análisis de la interfase entre dos LII realizado mediante simulaciones atómicas de Dinámica Molecular. Estas simulaciones permitieron caracterizar la estructura y el comportamiento electrocapilar de la interfase entre los LII cloruro de 1-etil-3-metilimidazolio, [emim][Cl], y el cloruro de trihexil-tetradecil-fosfonio, [P6,6,6,14][Cl]. Además, se estudió la distribución y orientación de cada especie iónica a lo largo de la dirección perpendicular a la interfase, la densidad de carga eléctrica y el correspondiente perfil de potencial electrostático. Las simulaciones se llevaron a cabo bajo condiciones de tensión superficial constante, lo que permitió establecer una relación empírica entre tensión y potencial en la interfase.

Los resultados obtenidos muestran que la tensión superficial posee una dependencia no monotónica con la diferencia de potencial a través de la interfase, que sugiere desviaciones significativas con respecto al comportamiento de una interfase idealmente polarizable.



Potencial electrostático, $\Phi(z)$, en función de la posición reducida, Z/L_z , a diferentes tensiones superficiales, γ (expresadas en dina cm^{-1}) impuestas en la interfase. Z es la posición a lo largo del eje z . L_z es el largo de la caja de simulación a lo largo del eje z . Las franjas naranjas representan las zonas correspondientes a la interfase. El cálculo de la diferencia de potencial se realiza promediando el potencial en cada fase.



Relación entre tensión superficial γ , y potencial relativo de la interfase, $\Delta\Phi_{rel} = \Delta\Phi - \Delta\Phi_{ZC}$. El potencial de referencia, $\Delta\Phi_{ZC}$, corresponde al calculado para $\gamma = 20 \text{ dina/cm}$ (curva celeste, figura anterior).

Molecular structure of the interface between two Immiscible Ionic Liquids

ABSTRACT

Molecular Dynamics simulations were used to characterise the structure and electrocapillarity behaviour of the interface between the ionic liquids 1-ethyl-3-methylimidazolium chloride, [emim] [Cl], and trihexyltetradecylphosphonium chloride, [P6,6,6,14] [Cl]. The distribution and orientation of each ionic species along the perpendicular direction to the interface and the electric charge density and the corresponding electrostatic potential profile were studied. The simulations were carried out under conditions of constant surface tension which allowed to establish an empirical relationship between voltage and potential at the interface. The surface tension shows a non-monotonic dependence with the potential difference across the interface, which also suggests significant deviations from the behaviour of an ideally polarizable interface.