

Transiciones de fase líquido-vapor en un modelo primitivo de líquidos iónicos a temperatura ambiente

Marianela Martín Betancourt¹, J. M. Romero-Enrique¹ y L. F. Rull¹

(1) Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Universidad de Sevilla, Apartado de Correos 1065, 41080 Sevilla (España).

En las dos últimas décadas los líquidos iónicos a temperatura ambiente (LITA) han despertado un gran interés para numerosas aplicaciones como solventes poco contaminantes, debido a sus peculiares propiedades como su alta capacidad de disolución de un amplio rango de sustancias, baja toxicidad, poca tendencia a inflamarse y baja presión de vapor que los hace fácilmente reciclables y con volatilidad prácticamente nula [1]. Teóricamente los LITA se han estudiado mediante técnicas de simulación de modelos moleculares basados en cálculos *ab initio* [2].

El objetivo de nuestro trabajo es el desarrollo de un modelo sencillo que permita describir el comportamiento de fases de los LITA. Hemos estudiado mediante simulación en ordenador la transición líquido-vapor de una mezcla de esferas duras cargadas negativamente con esferocilindros duros con una carga puntual positiva en uno de los extremos, y su dependencia con la longitud del esferocilindro. Este modelo es una extensión del Modelo Primitivo Restringido para electrolitos y se han aplicado las técnicas de simulación previamente usadas para estos sistemas [3]. Nuestros resultados muestran un desplazamiento hacia temperaturas y densidades más bajas de la coexistencia líquido-vapor al incrementar la longitud del esferocilindro, lo que está en acuerdo cualitativo con la tendencia obtenida experimentalmente [4].

[1] J. D. Holbrey y K. R. Seddon, *Clean Products and Processes* **1**, 223 (1999)

[2] C. G. Hanke, S. L. Price y R. M. Lynden-Bell, *Molec. Phys.* **99**, 801 (2001); J. K. Shah y E. J. Maginn, *Fluid Phase Equilib.* **222-223**, 195 (2004).

[3] G. Orkoulas y A. Z. Panagiotopoulos, *J. Chem. Phys.* **101**, 1452 (1994); A. Z. Panagiotopoulos y S. K. Kumar, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2981 (1999); J. M. Romero-Enrique, G. Orkoulas, A. Z. Panagiotopoulos y M. E. Fisher *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4558 (2000); J. M. Romero-Enrique, L. F. Rull y A. Z. Panagiotopoulos *Phys. Rev. E* **66**, 041204 (2002); M. Martín-Betancourt, J. M. Romero-Enrique y L. F. Rull, en preparación (2006).

[4] M. J. Earle *et al*, *Nature* **439**, 831 (2006); L. P. N. Rebelo *et al*, *J. Phys. Chem. B* **109**, 6040 (2005).