

Simulación de Monte Carlo del sistema {metanol + agua}: Estructura

A. Dopazo-Paz, P. Gómez-Álvarez*, L. Romaní y D. González-Salgado
Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias de Ourense
Universidad de Vigo. As Lagoas s/n. 32004 Ourense

Las anomalías detectadas experimentalmente en las propiedades termodinámicas del sistema {metanol+agua} han sido el punto de partida de un gran número de estudios que han buscado esclarecer el origen a escala molecular de este comportamiento.¹ Recientes experimentos de dispersión de neutrones²⁻⁵ han proporcionado una imagen de la mezcla que discrepa de la aceptada en las últimas décadas, la propuesta por Frank y Evans.⁶ En este nuevo contexto, la distribución molecular muestra una aparente *microinmiscibilidad*; las moléculas de metanol se agrupan formando clusters en los que los grupos apolares CH_3 aparecen enfrentados mientras que las de agua mantienen el tipo de estructura presente en el líquido puro, de manera que apenas se ve afectada por la presencia de metanol.

La relación de esta nueva visión con el comportamiento termodinámico aún no ha sido establecida. La técnica de simulación molecular por el método de Monte-Carlo es una herramienta adecuada para el análisis de este tipo de problemas. Para ello, es necesario desarrollar un potencial intermolecular que describa correctamente el comportamiento experimental (macroscópico y microscópico) de estos sistemas. En el caso de los líquidos puros, agua y metanol, existen una amplia variedad de potenciales con distinto grado de complejidad que verifican esas premisas, sin embargo, el desarrollo de un potencial intermolecular para el sistema {metanol+agua} no ha sido abordado en detalle.

En este trabajo, se explora la capacidad de un potencial intermolecular para la descripción de la estructura (funciones de distribución radial) del sistema {metanol+agua}. El potencial se ha construido a partir del potencial TIP4P⁷ para las interacciones entre moléculas de agua, el OPLS⁸ para las interacciones entre

moléculas de metanol, y la combinación de ambos potenciales y la regla de mezcla de Lorentz-Berthelot para la descripción de las interacciones entre metanol y agua. Se han llevado a cabo simulaciones por el método de Monte Carlo en todo el intervalo de composiciones. El colectivo utilizado ha sido *NVT*, considerando $T = 298.15$ K y $N = 500$ moléculas en una celda cúbica de lado L bajo condiciones de frontera periódicas. Las densidades fueron obtenidas a partir de simulaciones previas⁹ en el colectivo *NPT*, asumiendo condiciones estándar de presión y temperatura. Los resultados se han comparado con los obtenidos a partir de los estudios de dispersión de neutrones.²⁻⁵

* ga_paula@uvigo.es

¹ F. Franks and D. J. G. Ives, *Quat. Rev. Chem. Soc.* **20**, 1 (1966).

² A. K. Soper and J. L. Finney, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4346 (1993).

³ S. Dixit, A. K. Soper, J. L. Finney, and J. Crain, *J. Europhys. Lett.* **59**, 377 (2002).

⁴ S. Dixit, J. Crain, W. C. K. Poon, J. L. Finney, and A. K. Soper, *Nature* **416**, 829 (2002).

⁵ A. K. Soper, L. Dougan, J. Crain, and J. L. Finney, *J. Phys. Chem. B* **110**, 3472 (2006).

⁶ H. S. Frank and M. W. Evans, *J. Chem. Phys.* **13**, 507 (1945).

⁷ W. L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J. D. Madura, R. W. Impey, and M. L. Klein, *J. Chem. Phys.* **79**, 926 (1983).

⁸ W. L. Jorgensen, *J. Phys. Chem.* **90**, 1276 (1986).

⁹ A. Dopazo-Paz, P. Gómez-Álvarez, D. González-Salgado, and L. Romaní, '*Simulación de Monte Carlo del sistema {metanol + agua}: propiedades termodinámicas*', FisEs08.