



Universidad de Granada



Facultad de
Ciencias
Sección de
Físicas

Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a:	Delfi Bastos González
Departamento y Área de Conocimiento:	Departamento de Física Aplicada
Cotutor/a:	Leonor Pérez Fuentes
Departamento y Área de Conocimiento:	Departamento de Física Aplicada

Título del Trabajo:	Estudio de las interacciones ión-superficie en medio acuoso mediante simulaciones de Dinámica Molecular
Tipología del Trabajo: (Según punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/15)	Estudio de casos teóricos o prácticos

Breve descripción del trabajo:

El agua líquida es un fluido muy común en nuestra Tierra, además de ser esencial para la vida. Debido a su importancia para el ser humano, este fluido ha sido ampliamente tratado a lo largo de los años, existiendo numerosos estudios en la bibliografía. Sin embargo, a pesar de su simple fórmula química, el agua no se comporta como un fluido estándar, sino que presenta anomalías y hoy en día todavía no se comprende completamente su comportamiento. Esto plantea uno de los retos más interesantes en el campo de la física en la actualidad.

En la naturaleza, el agua no se encuentra de forma pura, sino que existen diversas sustancias cargadas disueltas o dispersas en ella. Estos compuestos iónicos a su vez pueden modificar en menor o mayor grado las propiedades del agua, especialmente en las proximidades de una interfaz. Esto plantea otro interesante problema como es la especificidad iónica. Desde que se iniciaron los primeros estudios de especificidad iónica en 1888 por Franz Hofmeister, se conoce que cada ión interacciona de forma distinta o específica con una interfaz dada, incluso iones de la misma valencia. Por tanto, el tipo de sal que esté disuelto en el medio afecta a las propiedades de las interfaces. En las series de Hofmeister, los iones se clasifican en función de su grado de hidratación como kosmotrópicos (fuertemente hidratados) o caotrópicos (débilmente hidratados). Algunos de los factores que pueden ser causantes de la especificidad iónica son propiedades del ión como el tamaño, polarizabilidad o la hidratación, así como las características de la interfaz. Uno de los mecanismos propuestos en la bibliografía para explicar este fenómeno es la acumulación o exclusión de los iones en las interfaces según el carácter caotrópico/kosmotrópico del ión y la hidrofobicidad/hidrofilicidad de la superficie. Estas características de iones e interfaces están directamente ligadas al tipo de solvente, que por tanto juega un papel clave en estas interacciones, ya que están mediadas por el solvente.

En las series de Hofmeister se clasifican sobre todo iones atómicos o de pequeño tamaño, sin embargo en los últimos años se está ampliando esta clasificación a iones moleculares más complejos. Un ejemplo de ello son los iones denominados polioxometalatos (POMs). Estos iones moleculares y de gran tamaño han sido muy estudiados en el ámbito de la química (catalizadores) y la bioquímica (aplicaciones médicas), sin embargo, en la bibliografía existen pocos estudios acerca de cómo se comportan estos iones a nivel físico.

Campus
Fuentenueva
Avda. Fuentenueva
s/n
18071 Granada
Tfno. +34-958242902
fisicas@ugr.es

Comisión Docente de Físicas
Facultad de Ciencias



En este trabajo se pretende estudiar el comportamiento de los POMs en solución acuosa y cuando interaccionan con superficies hidrófobas o hidrófilas. Para ello se realizarán simulaciones de Dinámica Molecular para estudiar si estos iones se adsorben sobre las superficies, así como cuantificar su grado de interacción. Los resultados obtenidos mediante simulaciones podrán relacionarse con medidas experimentales ya realizadas en nuestros laboratorios. En concreto medidas de movilidad electroforética de micropartículas de poliestireno (hidrófobas) y microcápsulas de quitosano (hidrófilas) en presencia de sales POMs. A su vez, dentro del marco de este trabajo se podrá ampliar el trabajo experimental. A partir de estos datos experimentales será posible estimar el número de iones adsorbidos sobre cada tipo de superficie. La combinación de simulaciones y experimentos permitirá comprender la interacción microscópica ión-superficie que da lugar al comportamiento macroscópico que se muestra experimentalmente.

Objetivos planteados:

- Estudio de la interacción ión-superficie mediada por el agua de iones tipo POMs con superficies planas hidrófobas e hidrófilas con simulaciones de Dinámica Molecular.
- Comparación de los resultados obtenidos por simulación con resultados experimentales ya disponibles (medidas de movilidad electroforética de micropartículas hidrófobas e hidrófilas en presencia de POMs).
- Clasificación de los iones dentro de las series de Hofmeister.

Metodología:

- Simulaciones de Dinámica Molecular mediante el software NAMD y análisis de los resultados con el software VMD. Estos programas son de uso libre dentro del ámbito científico y están distribuidos por el Theoretical and Computational Biophysics Group de la Universidad de Illinois (EEUU).
- Obtención de la carga eléctrica de las micropartículas en presencia de los POMs y relación con los resultados obtenidos por simulación a partir de modelos teóricos sencillos.

Bibliografía:

- [1] Kunz, W.; Henle, J.; Ninham, B. W. *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*, 9, 19–37, (2004)
- [2] López-León, T.; Santander-Ortega, M.J.; Ortega-Vinuesa, J.L. and Bastos-González, D. *J. Phys. Chem. C*, 112, 16060–16069, (2008)
- [3] Jürgensen, A. and Moffat, J.B. *Catalysis Letters*, 34, 237–244, (1995)
- [4] Naskar, B.; Diat, O.; Nardello-Rataj, V. and Bauduin, P. *J. Phys. Chem. C*, 119, 20985–20992, (2015)
- [5] Chaumont, A. and Wipff, G. *Eur. J. Inorg. Chem.*, 1835–1853, (2013)
- [6] Phillips, J.C.; Braun, R.; Wang, W.; Gumbart, J.; Tajkhorshid, E.; Villa, E.; Chipot, C.; Skeel, R.D.; Kale, L. and Schulten, K.J. *Comput. Chem.*, 26, 1781–1802, (2005)
- [7] Huang, D.M.; Cottin-Bizonne, C.; Ybert, C. and Bocquet, L. *Langmuir*, 24, 1442–1450 (2008)
- [8] *Encyclopedia of Surface and Colloid Science*. Vol. 4. Edited by P. Somasundaran. Taylor & Francis Group. (2006)
- [9] Besteman, K.; Zevenbergen, M. and Lemay, S. *Phys. Rev. E*, 72, 061501 (2005)
- [10] Calero, C.; Farauto, J. and Bastos-González, D. *J. Am. Chem. Soc.*, 133, 15025–15035, (2011)
- [11] Pérez-Fuentes, L. Specific effects of organic and inorganic ions on soft interfaces. Ph.D. Thesis. University of Granada, (2016)



Universidad de Granada



Facultad de
Ciencias
Sección de
Físicas

A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG
Alumno/a propuesto/a:

Granada, 23 de Mayo 2016

Fdo: Delfi Bastos González

Fdo: Leonor Pérez Fuentes

Campus
Fuentenueva
Avda. Fuentenueva
s/n
18071 Granada
Tfno. +34-958242902
fisicas@ugr.es

Comisión Docente de Físicas
Facultad de Ciencias