

ENTROPIA Y ENTALPIA DEL PROCESO DE ADSORCION DE POLIELECTROLITOS SOBRE UNA SUPERFICIE CARGADA

Claudio F. Narambuena, Dante M. Beltramo y
Ezequiel P.M. Leiva

Unidad de Matemática y Física. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Nacional de Córdoba.
e-mail: claudionarambuena@fcq.unc.edu.ar

Los Polielectrolitos (PE's) son polímeros de cadena lineal que en solución acuosa pueden adquirir carga eléctrica en sus monómeros. Estas soluciones de PE's, muestran sorprendentes propiedades fisicoquímicas [1]. Una propiedad que es de interés para nosotros es la adsorción de PE's en superficies de carga opuesta al PE. En principio, este tipo de adsorción se origina por interacciones electrostáticas. Experimentalmente se observa que en ciertas circunstancias la cantidad de PE adsorbido es mayor a la necesaria para lograr una neutralización de la superficie (compensación de carga) y por lo tanto se origina una densidad de carga opuesta a la de la superficie original (reversión de carga). Este fenómeno es esencial para la adsorción secuencial de PE's (Multicapas de PE). [2]

Nosotros hemos llevado a cabo un extensivo estudio por simulaciones computacionales de la adsorción de PE's en una superficie cargada. Esto se realizó empleando un modelo primitivo para el PE y los iones, tomando en cuenta todos los iones explícitamente, por medio de simulaciones con el algoritmo de Monte Carlo en un ensamble gran canónico en el cual podemos variar explícitamente la fuerza iónica.[3]

En base a lo descripto, hemos logrado obtener una reversión de carga de una superficie por adsorción de PE, teniendo en cuenta solamente la electrostática del sistema.

Además, por medio de ecuaciones de campo medio [4] hemos estimado los cambios en energía libre del proceso, teniendo en cuenta la ganancia entropica por la liberación de iones, los cambios conformacionales sufridos por el Polielectrolito y las interacciones electrostáticas. De estas medidas se deduce que la verdadera fuerza impulsora del proceso es la ganancia en entropía traslacional de los iones pequeños, acompañado de un aumento de entalpía del sistema. Los resultados de este trabajo han sido publicados recientemente en ref. [5].

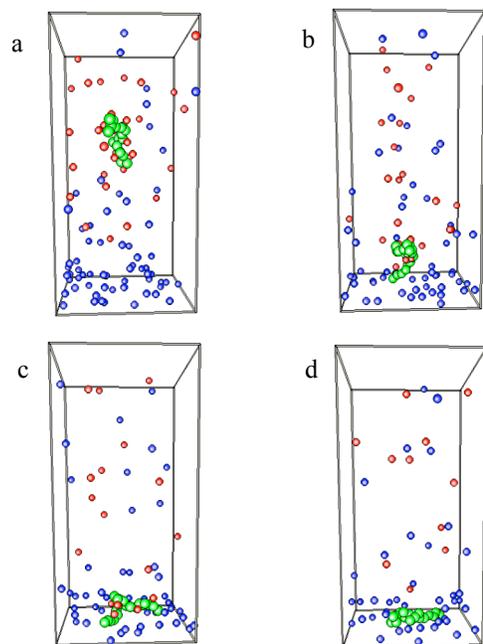


Figura 1.- Configuraciones de una simulación de la adsorción de una cadena de 20 monómeros en una superficie cargada. Rojo: iones negativos.. Azul: iones positivos. Verde: polielectrolitos.

Referencias

1. Tsetska Radeva. Sterthaus, R. Physical Chemistry of Polyelectrolytes. Marcel Dekker, 2001.
2. Multilayer Thin Films. Sequential Assembly of Nanocomposite Materials. Edited by Gero Decher and Joseph B. Schlenoff. Wiley-VCH (2003).
3. G.M. Torrie; J.P. Valleau. *J. Chem. Phys.* 1980, 73, 5807.
4. Borukhov, I.; Andelman, D.; Orland, H., *Macromolecules* 1998, 31, 1665.
5. Narambuena, C.F.; Beltramo D.M.; Leiva, P.M. *Macromolecules* 2007, 40, 7336.