

# Predicción de las propiedades interfaciales de la Hidroquinona mediante Dinámica Molecular

J. M. Olmos<sup>1</sup>, J. M. Míguez<sup>2</sup>, A. I. Moreno-Ventas Bravo<sup>2</sup>, M. M. Pineiro<sup>3</sup> and F. J. Blas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Madrid, Departamento de Química Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, E28049 Madrid, Spain

<sup>2</sup>Universidad de Huelva, Laboratorio de Simulación Molecular y Química Computacional, CIQSO-Centro de Investigación en Química Sostenible, Departamento de Ciencias Integradas, Facultad de Ciencias Experimentales, E21071 Huelva, Spain

<sup>3</sup>Universidade de Vigo, Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias do Mar, Universidade de Vigo, Lagoas-Marcosende s/n, 36310 Vigo, Spain

Este trabajo presenta un detallado análisis del equilibrio de fases líquido-vapor y de las propiedades interfaciales de una sustancia química tan compleja como la hidroquinona en un rango de temperaturas comprendido entre 480K y 580K. La investigación presentada se ha llevado a cabo mediante la técnica de simulación molecular, una herramienta indispensable hoy en día en ámbitos como la Química-Física al permitir obtener propiedades estructurales y microscópicas difícilmente accesibles desde el punto de vista experimental y analizar condiciones termodinámicas inalcanzables experimentalmente. Concretamente, este trabajo se ha realizado mediante la técnica de simulación molecular denominada Dinámica Molecular, empleando el programa GROMACS (versin 4.6.5) en el colectivo canónico (NVT) y mediante el método de coexistencia directa, que consiste en poner en contacto directo en una misma caja de simulación las distintas fases presentes en los sistemas objeto de estudio.

Los modelos moleculares seleccionados para describir el comportamiento de la hidroquinona pertenecen a la familia de campos de fuerza denominados TraPPE (Transferable Potentials for Phase Equilibria) y OPLS (Optimized Potentials

for Liquid Simulations). La parametrización de los distintos grupos, así como los potenciales de enlace, torsión y flexión que forman parte de cada uno de los modelos moleculares utilizados, se han obtenido de la bibliografía a excepción del modelo Trappe-UA que es propuesto por primera vez en este trabajo a partir de la parametrización del benceno. Aunque el modelo TraPPE ya ha sido utilizado previamente por otros autores para describir el equilibrio de fases líquido-vapor y las propiedades interfaciales de la hidroquinona, los restantes modelos nunca han sido utilizados con este fin.

La simulación molecular predice correctamente la coexistencia de dos fases, una fase líquida en contacto con una fase vapor, a las condiciones termodinámicas consideradas. Los perfiles de densidad obtenidos han sido analizados en detalle en la región interfacial y han permitido calcular las densidades de coexistencia de cada fase. Finalmente, se han calculado otras propiedades como la presión de vapor y la tensión interfacial para mostrar más claramente la eficacia de los modelos moleculares propuestos en este trabajo, al comparar los resultados obtenidos con datos experimentales disponibles en la bibliografía.