

Estudio por simulación computacional de la disolución de alcanos lineales en agua: mecanismo y configuraciones a nivel atómico molecular

Tesista: Lic. Ezequiel Luis Murina

Directores de Tesis: Dr. Roberto Fernández Prini y Dr. Claudio Pastorino
Consejero de Estudios: Dr. Fabio Cukiernik

La estructura adoptada por los solutos y la dinámica del proceso de disolución de alcanos lineales de alta masa molecular (LCA) en agua es un tema de gran importancia para conocer el comportamiento de proteínas y otros sistemas de interés biológico que tienen en sus moléculas cadenas hidrofóbicas que, se sabe, son importantes en mantener la estructura terciaria de las proteínas [1, 2]. Recientemente, se ha mostrado que en condiciones ambiente los LCA disueltos en agua tienen configuraciones muy similares a las que muestran en el vapor [3, 4, 5]; es decir, que el solvente no juega un papel preponderante y las moléculas disueltas mantienen conformaciones no colapsadas hasta LCA de largo de hasta 20 carbonos [6].

En los que respecta a la transferencia de LCA desde una fase gaseosa a solución, hasta donde sabemos, no hay trabajos que brinden una descripción, a nivel molecular, del proceso de disolución en la interfaz líquido/vapor. Para solutos no polares pequeños, la disolución se da en función de la probabilidad de formación de cavidades en el solvente que admitan alojar una molécula de soluto [7]. Sin embargo, en el caso de solutos como los que pretendemos estudiar, LCA, ese no parece ser el mecanismo para alojar moléculas de tal tamaño. Además de la relevancia teórica, el conocimiento del comportamiento de esta clase de solutos a través de la interfaz tiene potencial impacto tecnológico en campos tan diversos como, por ejemplo, mecanismos de remoción de petróleo del medioambiente [8] y la potencia del efecto de anestésicos [9], entre otros.

En el seminario expondré los resultados obtenidos mediante simulaciones de dinámica molecular clásica para LCA de distinta longitud. Comenzaré presentando el caso de metano, su mecanismo de ingreso, y una descripción de la interfaz [10]. Luego, explicaré la metodología empleada para estudiar LCA más largos, mostraré los resultados referidos a las conformaciones que adquieren estos solutos a través de la interfaz y en regiones bulk. Finalmente, desarrollaré el estado del arte de mi investigación: la determinación de una interfaz líquido/vapor instantánea que reproduce los efectos de fluctuaciones térmicas, además de algunos detalles técnicos en cuanto al código de programación.

Bibliografia

- [1] V. Jayaraj, R. Suhanya, M. Vijayasarathy, P. Anandagopu and E. Rajasekaran, *Bioinformation*, 2009, **3**, 409–412.
- [2] R. R. Baldwin and G. D. Rose, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2016, **113**, 12462–12466.
- [3] A. L. Ferguson, P. G. Debenedetti and A. Z. Panagiotopoulos, *The Journal of Physical Chemistry B*, 2009, **113**, 6405–6414.
- [4] R. D. Mountain and D. Thirumalai, *Journal of the American Chemical Society*, 2003, **125**, 1950–1957.
- [5] L. Sun, J. I. Siepmann and M. R. Schure, *The Journal of Physical Chemistry B*, 2006, **110**, 10519–10525.
- [6] G. Graziano, *Chemical Physics Letters*, 2011, **511**, 262 – 265.
- [7] R. Fernandez-Prini, R. Crovetto, M. L. Japas and D. Laria, *Accounts of Chemical Research*, 1985, **18**, 207–212.
- [8] F. Hua and H. Wang, *Biotechnol Biotechnol Equip*, 2014, **28**, 165–175.
- [9] C. C. Pohorille A., Wilson M.A., *J Phys Chem B*, 1997, **101**, 782–91.
- [10] E. L. Murina, C. Pastorino and R. Fernandez-Prini, *Chemical Physics Letters*, 2015, **637**, 13 – 17.