

Sopas de polisulfuros: tratando de entender algo

Dr. Juan Pablo Marcolongo

Profesor DQIAQF / Investigador Asistente del INQUIMAE

- **Lunes 27 de mayo a las 13 hs.**
- **Aula: RFP - 3er piso, DQIAQF/INQUIMAE**
- **Streaming por el canal de [YouTube](#) del DQIAyQF.**

Resumen

Los polisulfuros aniónicos consisten en cadenas lineales de átomos de azufre que intervienen en diversos procesos fundamentales a nivel bioquímico, geológico, y también tecnológico. Si bien desde hace más de 40 años la comunidad científica trabaja activamente en la elucidación de estas especies, la caracterización experimental de estos compuestos, llevada a cabo en general por vías espectroscópicas indirectas, supone múltiples complicaciones derivadas de la gran dificultad de aislar las especies puras, ya que las soluciones de polisulfuros se encuentran como mezclas en equilibrio de variada especiación.

La simulación computacional juega entonces un rol prominente para elucidar y asignar la identidad de las distintas especies de sulfuros en equilibrio, algunas de las cuales tienen participaciones destacadas en los ciclos del azufre dentro de los contextos anteriormente mencionados.

En el seminario, presentaré un panorama completo referido a qué se conoce sobre estas especies, así como también las contribuciones realizadas en el área por parte de nuestro grupo de trabajo, enfatizando en la resolución del equilibrio conformacional presente en sistemas con polisulfuros disueltos.