



Mezclas agua-metanol: un estudio sistemático de la fase líquida y de la coexistencia directa de la interfaz con el hielo Ih.

Manuel Martínez Jiménez^{a,b}, Humberto Saint-Martin Posada^b

^aPosgrado en Ciencias Físicas, UNAM; México ^bInstituto de Ciencias Físicas, UNAM; México
mm_ximenez@yahoo.com

Mediante simulaciones de dinámica molecular se estudian las propiedades termodinámicas, dinámicas y estructurales de la mezcla agua-metanol como función de la fracción molar de metanol. A diferencia de los estudios reportados en la literatura reciente, en este caso se emplean modelos moleculares que, individualmente, reproducen el valor experimental de la constante dieléctrica en cada líquido a 298.15 K y $p=1$ bar. Estos potenciales analíticos son TIP4P/ ϵ para el agua,¹ y el modelo para metanol líquido propuesto por Salas, J. y Alexandre, J.² Los resultados preliminares sugieren que los modelos empleados podrán reproducir el comportamiento de la constante dieléctrica como función de la fracción molar de metanol.

Con el propósito de obtener una imagen molecular descriptiva del efecto anticongelante del metanol, también se presentan los resultados de las simulaciones de coexistencia directa³ entre las mezclas agua-metanol anteriores y el hielo Ih cerca del punto de fusión (cabe mencionar que la temperatura de fusión del hielo Ih con el modelo TIP4P/ ϵ es $T_f = 240$ K con $p=1$ bar¹).

¹Fuentes-Azcatl, R.; Alexandre, J. Non-polarizable force field of water based on the dielectric constant: TIP4P/ ϵ . J. Phys. Chem. B, **2014**, 118 (5), 1263-1272.

²Salas, F.J.; Alexandre, J. Systematic procedure to parametrize force fields for molecular fluids. J. Chem. Theory Comput., **2015**, 11 (2), 683-693.

³García, R.; Abascal, J.L.F.; Vega, C. The melting point of ice Ih for common water models calculated from direct coexistence of the solid-liquid interface. J. Chem. Phys., **2006**, 124, 144506.