

## MODELADO DE PROPIEDADES DE DISOLVENTES SUPRAMOLECULARES PARA PROCESOS DE EXTRACCIÓN ANALÍTICA

J.A. Salatti-Dorado, D. García-Gómez, S. Rubio

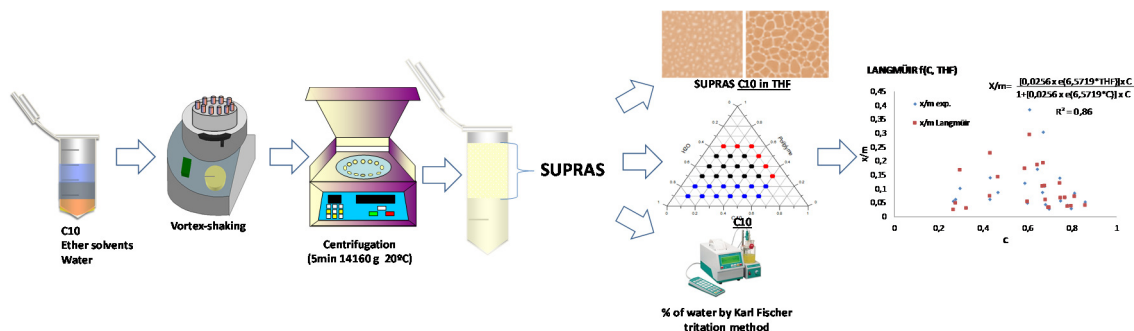
Departamento de Química Analítica, Instituto Universitario de Química Fina y Nanoquímica, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14071, Córdoba. [qa1rubrs@uco.es](mailto:qa1rubrs@uco.es)

Los disolventes supramoleculares (SUPRAS) pueden definirse como fases ricas en tensioactivo con organización a dos niveles, nano y microscópico. Se obtienen a partir de disoluciones acuosas o hidro-orgánicas de tensioactivo mediante procesos de autoensamblaje y coacervación. Su aplicación en procesos de extracción analítica es un área en expansión dada la elevada eficacia de extracción proporcionada por los SUPRAS para compuestos en un muy amplio intervalo de polaridad y peso molecular, y en muestras de diferente naturaleza y complejidad.

Una de las características más relevantes de los SUPRAS es la posibilidad de diseñar disolventes con propiedades programadas para que cumplan funciones específicas. Esta característica deriva de la reversibilidad/reorganización de las estructuras supramoleculares que lo integran en respuesta a modificaciones ambientales. Así, se han obtenido SUPRAS a partir de alcoholes alquílicos y ácidos carboxílicos en medio THF-agua que muestran propiedades de acceso restringido, lo que ha permitido la integración de la extracción y limpieza de la muestra en una única etapa.

Hasta la fecha, el diseño de SUPRAS se ha basado en ensayos de prueba y error y el estudio de sus propiedades en el ajuste de ecuaciones matemáticas a los resultados experimentales. Dado que el diseño y producción de disolventes con propiedades programadas aumenta notablemente la capacidad de mejorar la selectividad, rendimiento y costes de los procesos de extracción, sería de gran interés el desarrollo de modelos teóricos que permitan predecir las propiedades de los SUPRAS en función de las condiciones ambientales.

Se presenta en esta comunicación un primer modelo teórico, basado en una modificación del modelo clásico de adsorción de Langmuir, para SUPRAS sintetizados a partir de ácidos carboxílicos en medios hidro-orgánicos. Este modelo permite predecir, a partir de la composición inicial del medio hidro-orgánico, la composición acuosa de los agregados hexagonales inversos que constituyen el SUPRAS. Esto permite, por consiguiente, estimar el tamaño de la cavidad acuosa de los mismos, y, como consecuencia, evaluar su capacidad para la exclusión de compuestos en base a su tamaño molecular. Su aplicabilidad se ha comprobado para uno de los tensioactivos más utilizados (ácido decanoico) y para muy diversos disolventes orgánicos de naturaleza etérea (THF, dioxano, dioxolano y mono-, di-, tri-, tetra- y poli-glima). En todos los casos, el ajuste de los datos experimentales al modelo planteado fue muy satisfactorio ( $r > 0,9$ ). Cabe destacar que el desarrollo de este modelo teórico no solo permite predecir la composición del SUPRAS y las propiedades que de ella se derivan, sino que también establece las bases para un conocimiento más profundo de estos sistemas supramoleculares. Por ejemplo, el modelo planteado responde a la ecuación de Van't Hoff, lo que permite la obtención directa de parámetros termodinámicos como la entalpía y la entropía del proceso de autoensamblaje del SUPRAS.



**Agradecimientos:** Los autores agradecen el apoyo financiero del MINECO (Proyecto CTQ2014-53539-R) y FEDER. J.A.S.D. y D.G.G. agradecen igualmente sus contratos de postgrado (FPU13/03796) y postdoctoral (FJCI-2014-20052), respectivamente.