22 de febrero de 2012
Fuente: iAgua.es

(UGR) La difusión anormalmente rápida del agua confinada en nanotubos se debe a la competición entre la formación de enlaces por puentes de hidrógeno y la disponibilidad de volumen libre para que las moléculas se reorganicen. Así explican por primera vez científicos de las universidades de Granada y Barcelona una de las anomalía del agua.

Esta molécula en estado líquido posee un extraño conjunto de propiedades que los demás compuestos químicos no comparten: hasta un total de 65 anomalías. Algunas de ellas son conocidas desde hace más de 300 años, como el hecho de que se expanda al enfriase por debajo de 4 grados centígrados.

Ahora los investigadores han descrito a nivel molecular cómo se difunde el agua líquida a través de nanocanales, una especie de túneles extremadamente pequeños cuyo diámetro interno es de 1 a 100 nanómetros (nm, unidad de longitud que equivale a una milmillonésima parte de un metro y que se emplea en el ámbito de la nanotecnología). Los científicos utilizan los nanocanales para estudiar el comportamiento de las moléculas.

Este trabajo podría cambiar en un breve período de tiempo nuestra manera de entender los procesos de desalinización y filtrado del agua, procesos que, como acaba de demostrarse, se verán revolucionados, gracias a la introducción de membranas de grafeno y nanocapas de carbono en los que el agua se difunde muy rápidamente cuando la sección los poros es del orden de 1 nm.

# Anomalias de tipo dinámico

Muchas de las anomalías del agua son de tipo dinámico, por ejemplo la causante de que sus moléculas se muevan más deprisa cuanto mayor sea la densidad, y todas ellas son consecuencia de las propiedades de la red de enlaces por puente de hidrógeno que forman las moléculas de agua, que induce la formación de estructuras aproximadamente tetraédricas de cuatro moléculas alrededor de una central.

No obstante, esta disposición geométrica cambia con la presión y la temperatura y, hasta la fecha, a pesar de la sencillez de su

molécula, no existía ninguna descripción molecular del agua que describiera todas sus propiedades conocidas en el estado líquido.

Particularmente confusos son los resultados acerca de la difusión del agua confinada entre paredes hidrofóbicas. Ni los experimentos ni las simulaciones por ordenador terminan de aclarar si el confinamiento favorece o reduce la movilidad de las moléculas, aunque, grosso modo, parecen indicar que ésta disminuye o aumenta según que la anchura de los conductos sea inferior o superior a 1 nm.

En un artículo aparecido en la revista Physical Review, los profesores Francisco de los Santos Fernández (Universidad de Granada) y Giancarlo Franzese (Universidad de Barcelona) han estudiado mediante teoría y simulación cómo reacciona el agua cuando se confina a escala nanométrica entre dos placas hidrofóbicas.

Su trabajo ha demostrado que la difusión anormalmente rápida del agua nanoconfinada es consecuencia de la competición entre, por un lado, la disponibilidad de volumen libre para que las moléculas se reorganicen y, por otro, la rotura y formación de enlaces por puente de hidrógeno.

Cuando el agua se difunde en canales de sección superior a 1 nm, la difusión macroscópica sólo es posible si hay movimiento cooperativo de moléculas, con la consiguiente rotura de los enlaces por puente de hidrógeno en regiones de 1nm. En canales de sección inferior a 1 nm la difusión se ve facilitada por no tener que romper tantos enlaces. Así, según han demostrado en este artículo, 1 nm es la escala a la cual los efectos cooperativos en agua entran en juego y determinan las propiedades macroscópicas.

Este resultado podría encontrar aplicación en la desalinización y el filtrado del agua, procesos que, como acaba de demostrarse en dos artículos publicados en Science, se verán revolucionados por la introducción de membranas de grafeno y nanocapas de carbono en los que el agua se difunde muy rápidamente cuando la sección los poros es precisamente del orden de 1 nm.

**Referencia bibliográfica:**

F. de los Santos, G. Franzese."Relations between the diffusion anomaly and cooperative rearranging regions in a hydrophobically nanoconfined water monolayer". Physical Review E 85 (1): 010602 R, 2012. Dpi: 10.1103/PhysRevE.85.010602.