

PRIMEROS ESTADIOS DEL INTERCAMBIO IÓNICO EN MINERALES ARCILLOSOS: UNA APROXIMACIÓN DESDE LA DINÁMICA MOLECULAR

Maria Fernanda Contino Ramos^{1,2}, Carlos David Marrero Pérez², Dayaris Hernández Oliva², Anabel Lam Barandela²

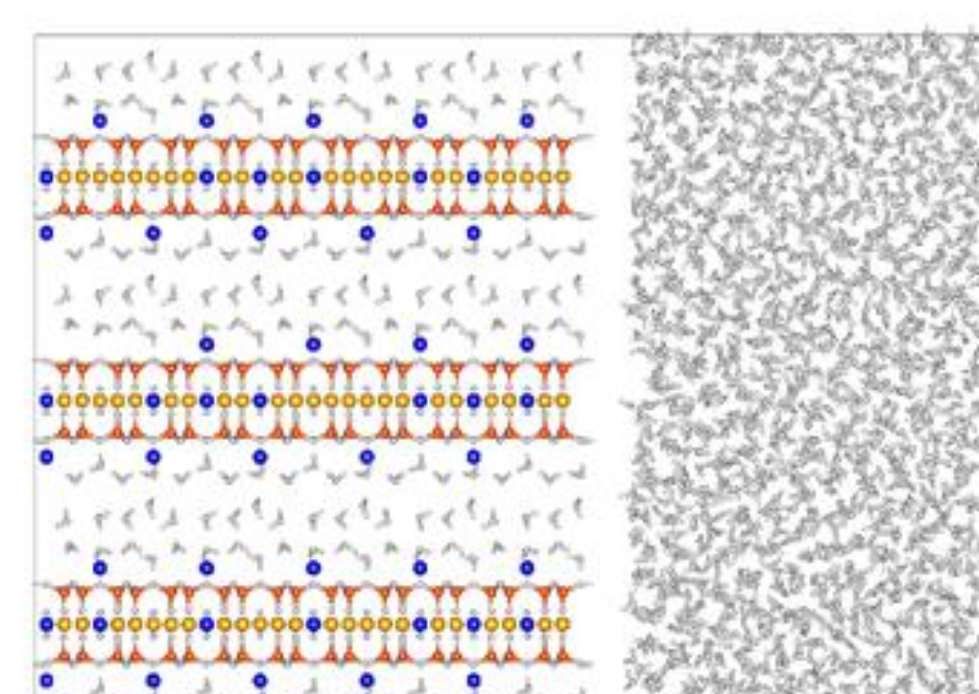
¹ Centro de Neurociencias de Cuba, La Habana, Cuba.

² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana (IMRE-UH), La Habana, Cuba.

Las arcillas y minerales arcillosos son materiales de probada eficacia en la industria farmacéutica como excipiente o ingrediente farmacéutico activo. Investigaciones recientes realzan su capacidad para modificar la primera etapa de la ruta Liberación-Absorción-Distribución-Metabolismo-Excreción de un fármaco. Arcillas sintéticas, como la litiofluorhectorita, que se activa al aumentar la temperatura y expande su espacio interlaminar permitiendo la entrada de especies químicas, resultan de gran interés para la comunidad científica. En este contexto, el intercambio iónico es un mecanismo fundamental para entender la formación y el funcionamiento de los sistemas híbridos arcilla/fármaco. Empleando simulaciones de Dinámica Molecular, estudiamos por primera vez los estadios iniciales del intercambio iónico en la litiofluorhectorita al ponerla en contacto con reservorios de cloruro de sodio (NaCl) y cloruro de cesio (CsCl) a concentraciones de 0.1 y 1 mol/L. Los resultados muestran que los cationes Na⁺, por su alta hidratación, generan un desorden estructural a baja concentración en el mineral arcilloso, mientras que a 1 mol/L la formación de clústeres mixtos impide parcialmente el deslizamiento de láminas. En cambio, los cationes Cs⁺, con menor hidratación y mayor radio iónico, favorecen el orden a 0.1 mol/L mediante la adsorción preferencial en cajas hexagonales, pero a 1 mol/L invierte este efecto estabilizador. El análisis del entorno de coordinación revela que el Cs⁺ forma complejos de esfera interna con la arcilla, mientras que el Na⁺ se adsorbe parcialmente hidratado. Estas simulaciones precisan atómicamente cómo el balance entre hidratación, selectividad y agregación iónica gobierna el intercambio iónico en la litiofluorhectorita.

METODOLOGIA

1 Se partió de un modelo de Li-FHt en contacto con un reservorio de agua por la dirección cristalográfica b.

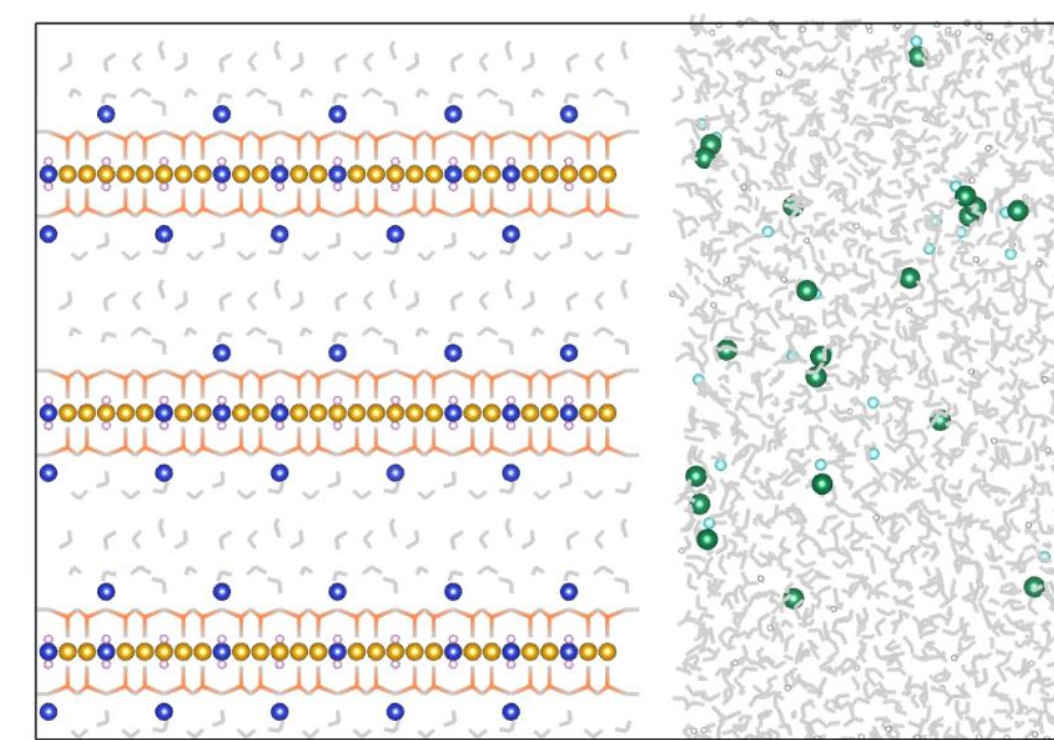
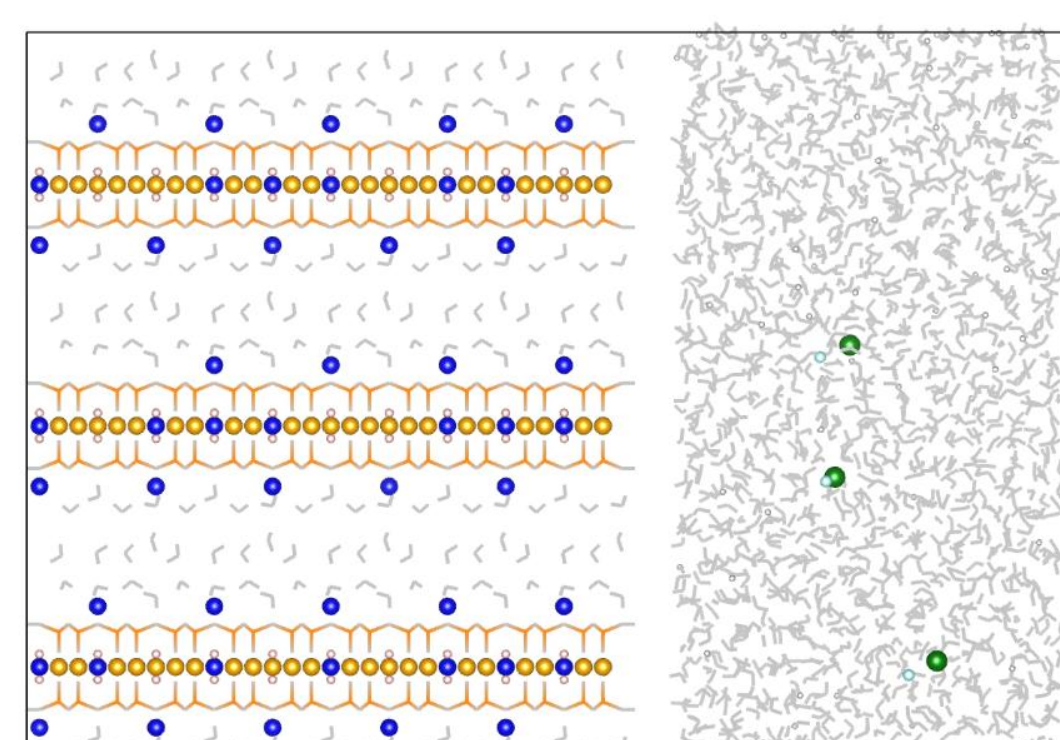


Simulaciones de DM
NPT
5 y 10 ns
Paso de integración: 1fs

2 Se partió de un modelo de Li-FHt en contacto con un reservorio de agua por la dirección cristalográfica b.

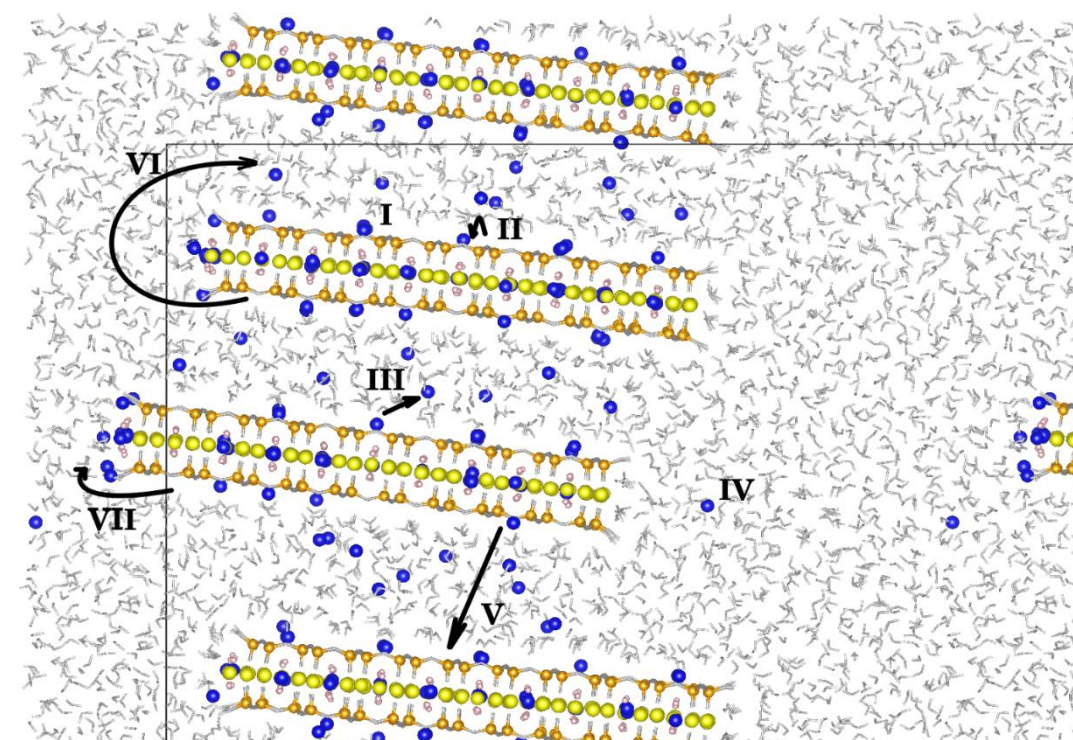
$C = 0,1 M$, 3 moléculas

$C = 1 M$, 20 moléculas



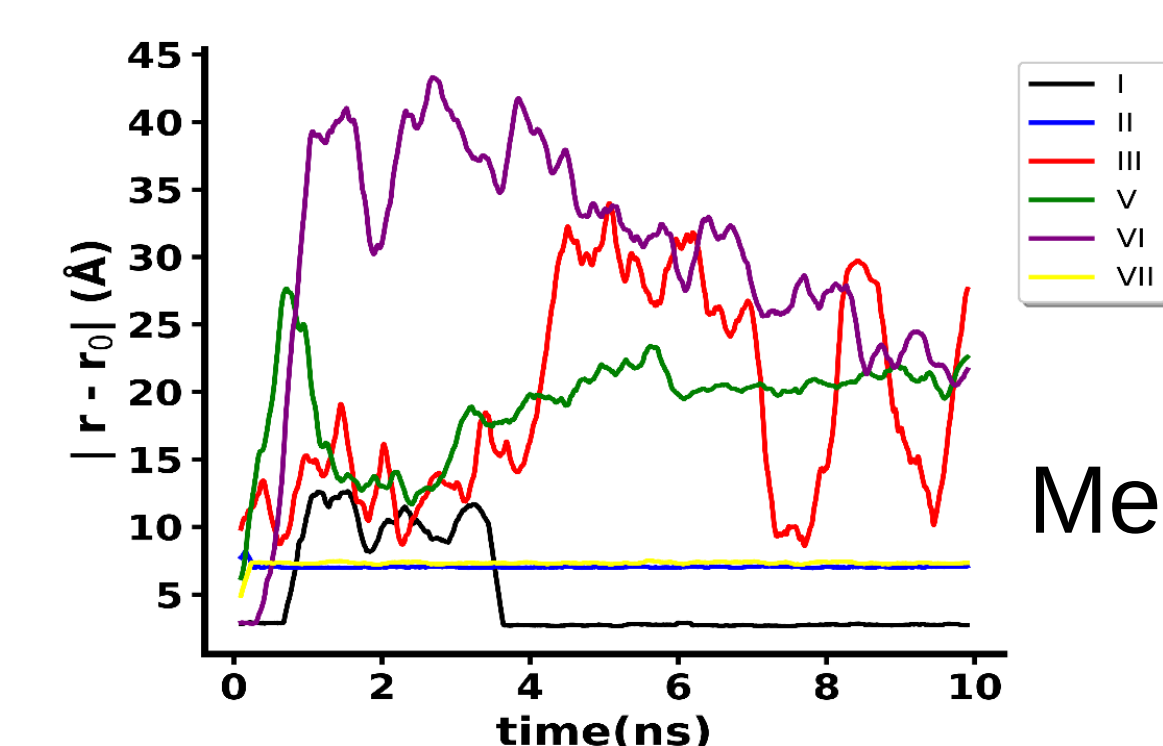
● Si
● Mg
● Li⁺
● Na⁺
● Cs⁺

Movimiento de los Li⁺



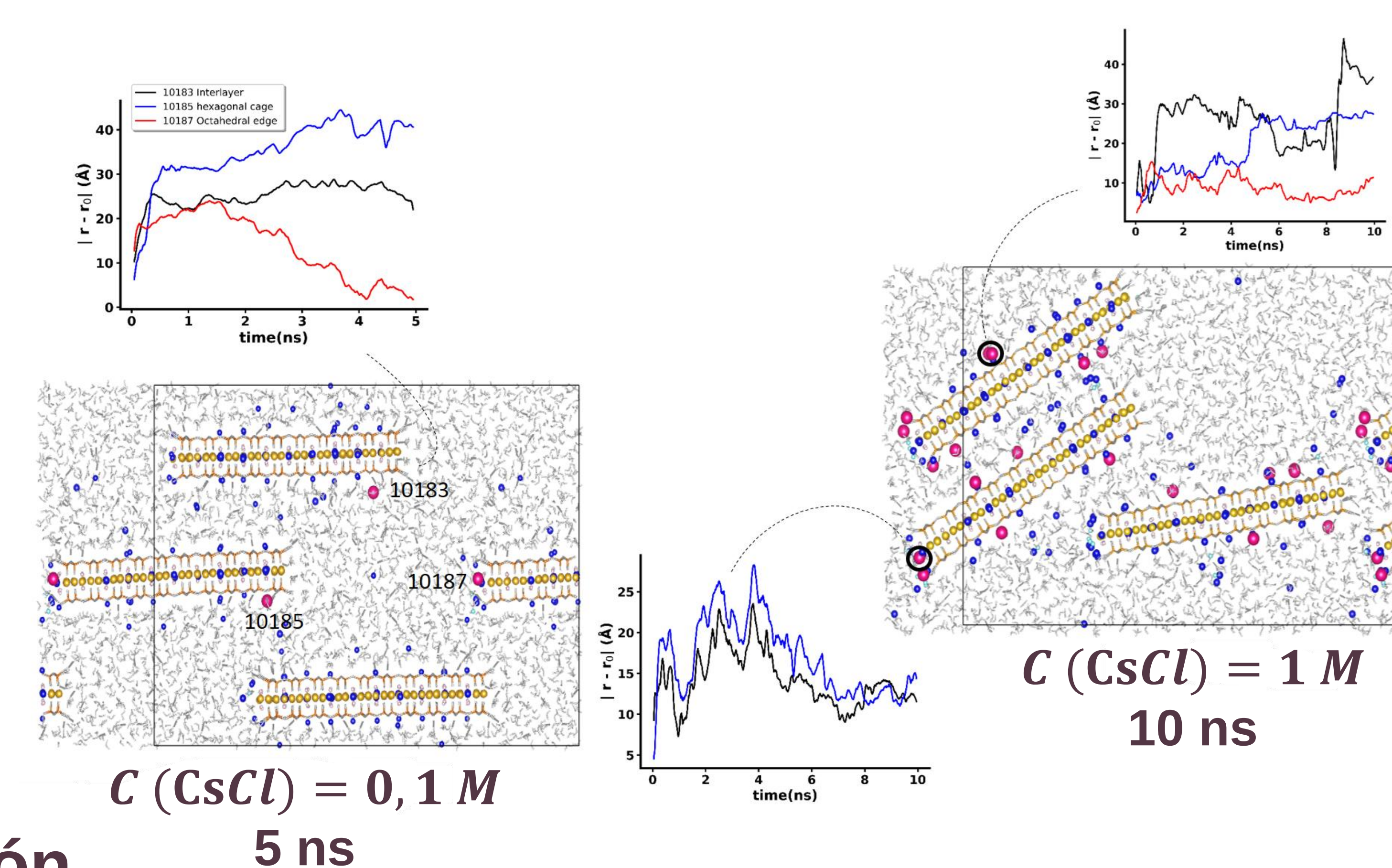
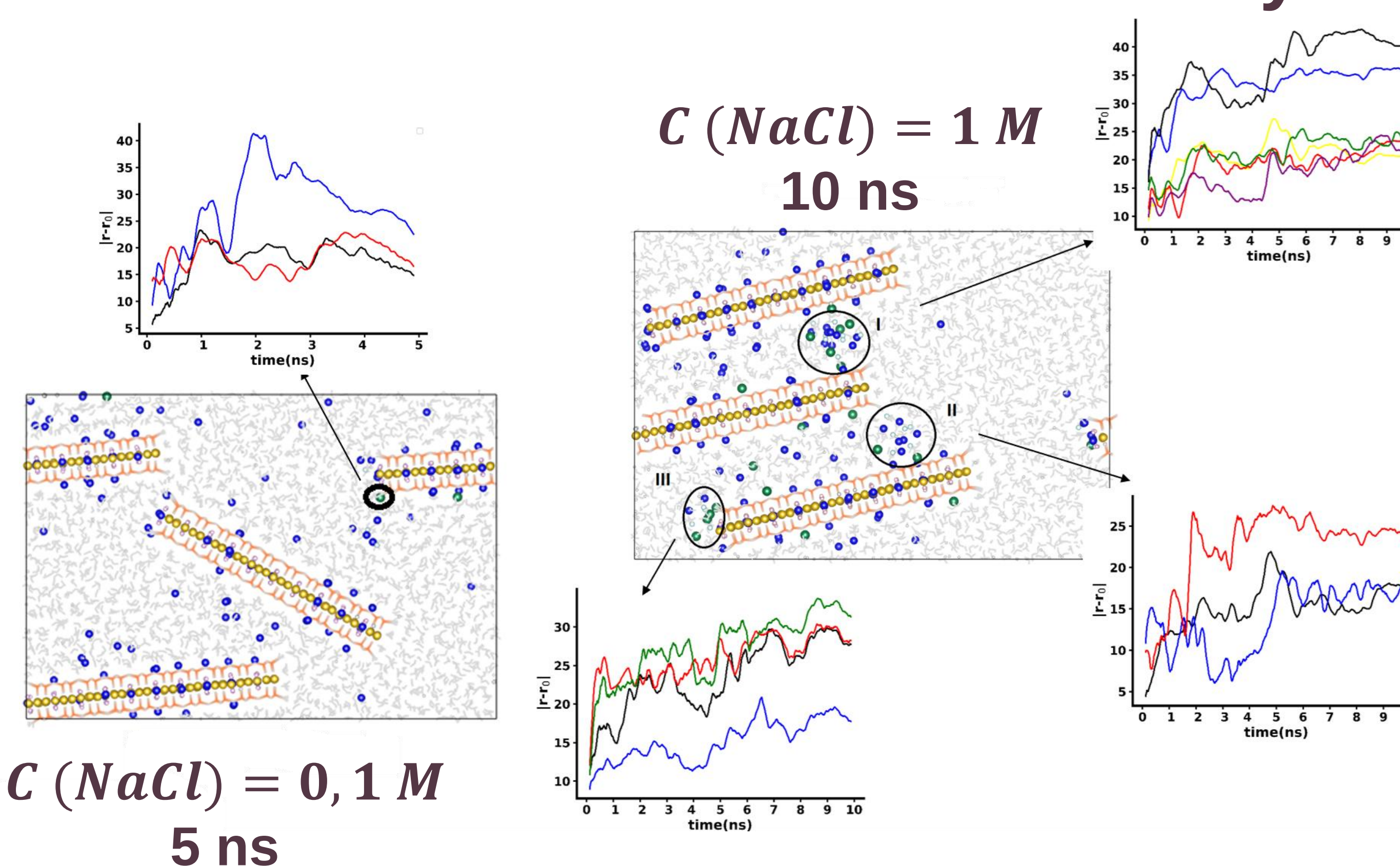
Tipos de movimientos de Li ⁺	010*	NaCl		CsCl	
		C= 0.1 M	C= 1 M	C= 0.1 M	C= 1M
I	10	-	-	5	8
II	23	36	35	33	31
III	18	29	31	26	25
IV	12	11	11	10	3
V	15	3	3	-	1
VI	12	11	10	16	22

Movimiento tipo de los Li⁺ en los modelos

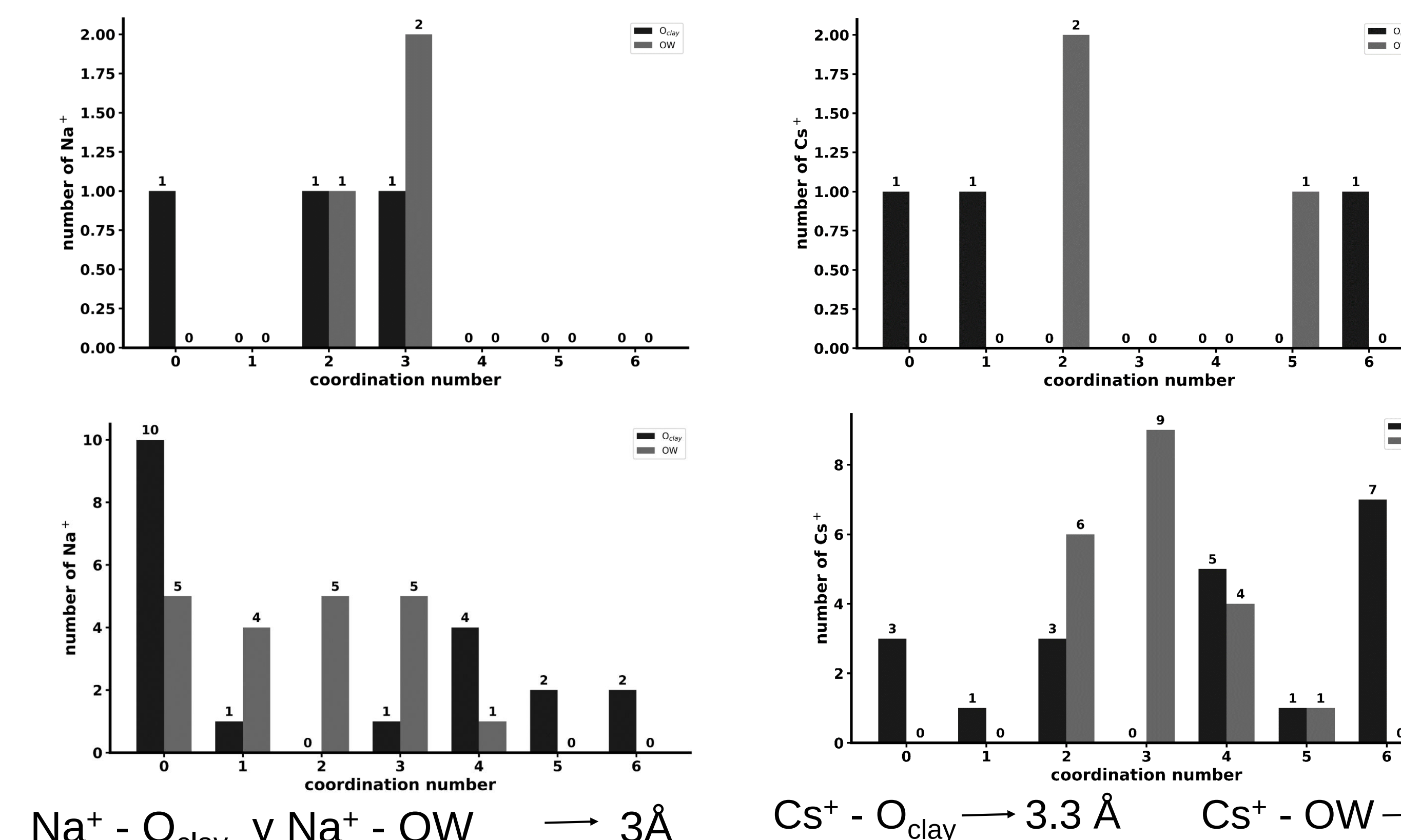


Mecanismo de difusión por saltos !

Deformación Estructural y Movimiento de los cationes externos



Intercambio iónico: entorno de coordinación



Na⁺ - O_{clay} y Na⁺ - OW → 3Å Cs⁺ - O_{clay} → 3.3 Å Cs⁺ - OW → 3.5 Å

Conclusiones

- ✓ El Na⁺ genera desorden por hinchamiento que se corrige parcialmente al formar clústeres mixtos a alta concentración, mientras que el Cs⁺ preserva el orden hasta superar una concentración crítica a 1 M.
- ✓ La movilidad del Li⁺ no varía de forma monótona con la concentración, ya que a 0,1 M tanto Na⁺ como Cs⁺ la incrementan, pero a 1 M el Na⁺ la reduce por agregación, mientras que el Cs⁺ la mantiene al desplazar selectivamente el Li⁺ hacia los bordes octaédricos.
- ✓ El Na⁺ forma clústeres con coordinación variable (anhídros o hidratados) mientras que el Cs⁺ se fija fuertemente a la arcilla formando complejos de esfera interna

Referencias

- [1] C. D. Marrero-P, «THE ROLE OF CLAY CHARGE IN THE MOBILITY OF COMPENSATING CATIONS: AN APPROACH FROM MOLECULAR DYNAMICS», Rev Cuba. Fis, vol. 42, n.o 1, 2025.
- [2] J. A. Greathouse, D. B. Hart, G. M. Bowers, R. J. Kirkpatrick, y R. T. Cygan, «Molecular Simulation of Structure and Diffusion at Smectite–Water Interfaces: Using Expanded Clay Interlayers as Model Nanopores», J. Phys. Chem. C, vol. 119, n.o 30, pp. 17126-17136, jul. 2015, doi: 10.1021/acs.jpcc.5b03314.
- [3] R. Sutton y G. Sposito, «Molecular Simulation of Interlayer Structure and Dynamics in 12.4 Å Cs-Smectite Hydrates», J. Colloid Interface Sci., vol. 237, n.o 2, pp. 174-184, may 2001, doi: 10.1006/jcis.2000.7416.