

## PROPIEDADES VOLUMÉTRICAS DE LA DL-ALANINA EN SOLUCIONES ACUOSAS DE TETRAFLUOROBORATO DE 1-BUTIL, 3-METILIMIDAZOLIO A DIFERENTES TEMPERATURAS

Manuel S. Páez<sup>a,\*</sup>, Francisco J. Páez<sup>a</sup> y Francisco J. Torres<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Córdoba, Carrera 6 No. 76-103, Km 3, Vía Cereté, Córdoba, Colombia

<sup>b</sup>Departamento de Física, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Córdoba, Carrera 6 No. 76-103, Km 3, Vía Cereté, Córdoba, Colombia

Recebido em 07/12/2015; aceito em 28/01/2016; publicado na web em 12/04/2016

VOLUMETRIC PROPERTIES OF DL-ALANINE IN AQUEOUS SOLUTIONS OF TETRAFLUOROBORATE 1-BUTYL, 3-METHYLIMIDAZOLIUM AT DIFFERENT TEMPERATURES. Densities of DL-alanine in aqueous ionic liquid, 1-butyl, 3-methylimidazolium tetrafluoroborate solutions were measured from 283.15 to 313.15 K. The densities measured were used to calculate apparent molar volumes ( $V_\phi$ ), apparent molar volume limits ( $V_\phi^\infty$ ), transfer molar volume limits ( $\Delta V_\phi^0$ ) and hydration number (NH). The behavior of ( $\Delta V_\phi^0$ ) was interpreted in terms of solute-solvent interactions on the basis of the cosphere overlap model. The hydration numbers were positive and explained by dehydration and electrostriction.

Keywords: volumetric properties; ionic liquids; hydration number.

### INTRODUCCIÓN

Es conocido que la adición de un co-soluto puede influir de manera significativa en el comportamiento de macromoléculas como proteínas y péptidos en solución acuosa, estabilizando o desestabilizando la estructura nativa de estas sustancias.<sup>1</sup> Sin embargo, también es ampliamente sabido que debido a la complejidad estructural de estas macromoléculas es bastante difícil realizar de manera directa estudios termodinámicos de ellas en solución, de ahí que podríamos utilizar compuestos modelos como los aminoácidos para aproximarnos al entendimiento del comportamiento de estas macromoléculas.<sup>2</sup>

Por otra parte, también se conoce que los electrolitos orgánicos, han sido utilizados para ayudar a comprender el efecto que tienen las interacciones electrostáticas e hidrofóbicas sobre la estabilidad de los aminoácidos; así mismo, es de esperar, que estos compuestos tengan influencia sobre la conformación macromolecular de las biomoléculas, mediante el debilitamiento de las interacciones repulsivas o atractivas inter o intra cadena y carga-carga, afectando de esta forma las interacciones hidrofóbicas de sus cadenas laterales con los grupos alquílicos.<sup>3</sup> Un grupo particular de electrolitos orgánicos, que por sus particulares propiedades<sup>4,5</sup> ha despertado el interés de la comunidad científica durante los últimos años, lo constituyen los denominados líquidos iónicos (LIs); estas sustancias son disolventes que se encuentran conformados totalmente por iones y se presentan en estado líquido a temperaturas ambiente.<sup>6</sup> El tetrafluoroborato de 1-butil, 3-metilimidazolio ([BMIm][BF<sub>4</sub>]) es históricamente uno de los líquidos iónicos más importantes y comúnmente más estudiado,<sup>7</sup> es considerado una sustancia anfifílica,<sup>8</sup> por lo cual, es un excelente candidato para estudiar el efecto que este tipo de sustancias pueden tener sobre las interacciones predominantes en las soluciones de biomoléculas.

En este trabajo, se presentan algunas propiedades volumétricas para las soluciones de DL-alanina en mezclas acuosas de [Bmim<sup>+</sup>][BF<sub>4</sub><sup>-</sup>]. Dichas propiedades, fueron utilizadas para analizar el comportamiento de las interacciones soluto-soluto y soluto-solvente en estas mezclas.

### PARTE EXPERIMENTAL

#### Reactivos

DL-alanina grado analítico (99%) fue adquirida de la casa comercial Alfa Aesar. [Bmim<sup>+</sup>][BF<sub>4</sub><sup>-</sup>] (≥98%) fue obtenido de Aldrich. Antes de su uso la DL-alanina fue recristalizada en soluciones acuosas de etanol al 62.5% y secada al vacío sobre P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. El agua utilizada fue doblemente destilada obteniéndose una conductividad menor a 2 mS cm<sup>-1</sup>.

#### Preparación de las soluciones

En este trabajo, se prepararon siete solventes pseudobinarios (mezclas acuosas de [Bmim<sup>+</sup>][BF<sub>4</sub><sup>-</sup>]), para mezclarlos con cantidades apropiadas de DL-alanina. Las soluciones fueron preparadas en la escala de molalidad utilizando el método gravimétrico, en recipientes de vidrio con tapa, tomando todas las precauciones necesarias para evitar la contaminación de las muestras y la pérdida de masa por evaporación de los líquidos utilizados.

Todas las medidas de masa fueron realizadas en una balanza analítica Ohaus con una sensibilidad de ± 0.1 mg.

#### Determinación de la densidad

Las densidades de los componentes puros y sus mezclas fueron determinadas con un densímetro de tubo vibratorio Anton Para DMA 5000, que tiene una reproducibilidad de 1 × 10<sup>-5</sup> g cm<sup>-3</sup> y una exactitud en la determinación de la temperatura de (± 0.001 °C).

### RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La densidad experimental de la DL-alanina en siete solventes pseudobinarios (soluciones acuosas de [Bmim<sup>+</sup>][BF<sub>4</sub><sup>-</sup>]), fueron ajustadas por un procedimiento de mínimos cuadrados con ayuda de la ecuación (1).

$$\rho = a + bm + cT + dm^2 + eT^2 + fmT + gm^3 + hT^3 + imT^2 + jm^2T \quad (1)$$

\*e-mail: mspaezm@gmail.com

**Tabla 1.** Parámetros de ajuste de la ecuación (1), para las mezclas de la DL-Alanina en siete solventes pseudobinarios. Cada etiqueta corresponde a la concentración del [Bmim<sup>+</sup>][BF<sub>4</sub><sup>-</sup>] en la mezcla binaria (agua+LI), que define a cada solvente pseudobinario

Solvente pseudobinario	0.1000	0.2000	0.3000	0.4000	0.5000	0.8000	1.0040
	Parámetros de ajuste de la ecuación (1)						
<i>a</i>	0.9051865	2.0052511	2.9640396	3.7197211	4.4620400	6.2552285	7.2175714
<i>b</i>	0.0385153	0.0300217	0.0884502	-0.0005426	0.0337465	0.0255694	0.0571851
<i>c</i>	0.0001975	-0.0106395	-0.0200580	-0.0274421	-0.0347091	-0.0522350	-0.0616487
<i>d</i>	-0.0634759	-0.1025910	-0.0881999	-0.0976932	-0.1170470	-0.1381559	-0.1902430
<i>e</i>	2.815E-06	3.855E-05	6.952E-05	9.370E-05	0.0001175	0.0001750	0.0002059
<i>f</i>	-0.0000175	4.807E-05	-3.502E-04	2.561E-04	3.394E-05	1.104E-04	-7.531E-05
<i>g</i>	0.2939288	0.3445261	0.3246210	0.3667170	0.5671414	0.6232306	0.7103785
<i>h</i>	-8.061E-09	-4.737E-08	-8.137E-08	-1.078E-07	-1.339E-07	-1.968E-07	-2.307E-07
<i>i</i>	-1.882E-08	-1.383E-07	5.365E-07	-4.921E-07	-1.107E-07	-2.539E-07	2.577E-08
<i>j</i>	5.3895E-05	0.0001560	0.0001206	0.0001326	0.0000802	0.0001144	0.0002620
$\sigma$	1.0306E-05	2.027E-05	3.026E-05	4.588E-05	5.914E-05	7.933E-05	9.100E-05

\* $\sigma$  es la desviación estándar del ajuste.

donde  $\rho$  es la densidad de la solución,  $m$  es la molalidad de la DL-alanina en el solvente pseudobinario, la cual toma valores entre 0.0000 y 0.10000 molal,  $T$  es la temperatura absoluta, y las letras minúsculas desde  $a$  hasta  $j$  son parámetros ajustables. Los resultados de este ajuste se muestran en la Tabla 1 y ellos permiten obtener valores de densidad con cinco cifras significativas intervalo de concentración mencionado.

A partir de las densidades obtenidas con ayuda de la ecuación (1), se calcularon los volúmenes molares aparentes  $V_{\phi}$ , utilizando la ecuación (2).

$$V_{\phi} = \frac{M}{\rho} - \frac{1000(\rho - \rho_0)}{m\rho\rho_0} \quad (2)$$

donde  $M$  es la masa molar de la DL-alanina,  $m$  es la molalidad de la DL-alanina, que es definida como las moles de DL-alanina por kilogramo de solvente pseudobinario (solución acuosa de [Bmim<sup>+</sup>][BF<sub>4</sub><sup>-</sup>]),  $\rho$  y  $\rho_0$  son respectivamente la densidad de la solución (DL-alanina + solvente pseudobinario) y la densidad del solvente pseudobinario. Los resultados para los volúmenes molares aparentes son reportados en la Tabla 2.

Para todos los casos, los volúmenes molares aparentes límites  $V_{\phi}^0$  fueron obtenidos con ayuda de la ecuación (3), mediante un procedimiento de regresión lineal.

$$V_{\phi} = V_{\phi}^0 + S_v m \quad (3)$$

donde  $S_v$  es la pendiente experimental. Los valores de  $V_{\phi}^0$  son mostrados en la Tabla 3.

Los  $V_{\phi}^0$  resultaron positivos y disminuyen con el aumento de la concentración del LI en cada solvente. Este hecho, evidencia una contracción del volumen aparente límite, debida a la intensificación de las interacciones entre la DL-alanina zwitterionica y las especies del co-solvente". Este mismo comportamiento fue reportado para la DL-alanina en soluciones acuosas de bromuro de 1-propil-3-metilimidazolio.<sup>9</sup>

Una observación a los datos de los  $V_{\phi}^0$  mostrados en la Tabla 3, indica que estos se incrementan al aumentar la temperatura, este hecho podría ser atribuido a un debilitamiento de las interacciones que resultan del incremento de la energía cinética de las partículas, produciéndose así un proceso de deshidratación de las moléculas de soluto desde los centros de solvatación hasta la fase volumétrica de la solución.

Los volúmenes molares de transferencia límites  $\Delta V_{\phi}^0$  de la

DL-alanina desde el agua pura hasta las soluciones acuosas de [Bmim<sup>+</sup>][BF<sub>4</sub><sup>-</sup>], fueron obtenidos utilizando la ecuación (5) y los resultados se muestran en la Tabla 4:

$$\Delta V_{\phi}^0 = V_{\phi}^0(\text{Ensolución acuosa de [Bmim][BF}_4]) - V_{\phi}^0(\text{Enagua}) \quad (5)$$

Recordando que en el estado de dilución infinita, las interacciones soluto-soluto se consideran ausentes, resulta entonces, que  $V_{\phi}^0$  proporcionan información acerca de la interacción de un co-solvente y un soluto.<sup>10</sup> Estas interacciones pueden ser analizadas con ayuda del modelo de las coesferas solapadas de Frank y Evans,<sup>11</sup> en virtud, a que en una solución de un aminoácido en mezclas acuosas de un líquido iónico se pueden presentar las interacciones descritas por Singh;<sup>12</sup> de aquí que los valores negativos de  $\Delta V_{\phi}^0$  puedan ser interpretados como resultado del predominio de las interacciones: Ion-hidrofóbica entre los grupos BMIm<sup>+</sup>/BF<sub>4</sub><sup>-</sup> del líquido iónico y los grupos apolares presentes en la DL-alanina y entre los grupos NH<sub>3</sub><sup>+</sup>/COO<sup>-</sup> del aminoácido y los grupos alquílicos presentes en el líquido iónico; e hidrofóbica-hidrofóbica entre el grupo metilo de la DL-alanina con los grupos metil, y butil del [Bmim<sup>+</sup>][BF<sub>4</sub><sup>-</sup>]. Este comportamiento contribuye a favorecer el proceso de deshidratación (que como se evidencia de los resultados de la Tabla 4, disminuye al aumentar la concentración del LI en la mezcla) produciéndose así una disminución en la estructura global del agua, producto del solapamiento de las co-esferas.<sup>12</sup> Estos resultados nos llevan a pensar que la DL-alanina se comporta como un soluto disruptor de la estructura tridimensional del agua en soluciones [Bmim<sup>+</sup>][BF<sub>4</sub><sup>-</sup>] a las temperaturas desde 293.15 hasta 313.15 K.

De acuerdo con Rajagopal,<sup>13</sup> los  $V_{\phi}^0$  para los aminoácidos pueden ser considerados como el resultado de la suma del volumen de Van der Waals  $V_{vw}$ , el volumen asociado con los huecos o espacios vacíos  $V_v$ , y el volumen de contracción debido a la electrostricción; asumiendo que  $V_{vw}$  y  $V_v$  tienen la misma magnitud en agua que en soluciones acuosas para la misma clase de solutos,<sup>14</sup> se pueden utilizar los cambios en los volúmenes de contracción producidos por el efecto de electrostricción para explicar el comportamiento en los valores de  $\Delta V_{\phi}^0$ ; de aquí que, los valores negativos de  $\Delta V_{\phi}^0$  se pueden explicar a partir del cambio en el volumen de contracción debido al efecto de electrostricción, ya que la presencia de [Bmim<sup>+</sup>][BF<sub>4</sub><sup>-</sup>] con sus partes apolares metil y butil contribuye a incrementar el efecto de electrostricción causada por el aminoácido. Millero,<sup>15-17</sup> planteó un modelo mediante el cual se pueden obtener los números de hidratación, propiedad esta que es sumamente sensible a los cambios en los efectos de electrostricción

**Tabla 2.** Volúmenes molares aparentes  $V_{\phi}^0$  para la D-L Alanina en siete solventes pseudobinario como función de la concentración molar (m) de la D-L Alanina a diferentes temperaturas

$m_{Alanina} \text{ mol} \cdot \text{Kg}^{-1}$	0.0100	0.0300	0.0500	0.0700	0.0900	0.1000
<b>T=283.15 K</b>						
0.0000	52.90	57.50	59.60	60.00	60.20	60.30
0.1000	55.92	57.90	58.55	58.64	58.63	58.62
0.2000	55.70	57.77	58.52	58.56	58.54	58.54
0.3000	55.55	57.63	58.29	58.48	58.46	58.45
0.4000	55.00	57.29	58.12	58.34	58.30	58.28
0.5000	53.85	56.14	57.37	57.72	57.68	57.65
0.8000	52.37	54.16	55.56	56.15	56.12	56.10
1.0040	50.24	52.47	54.00	54.65	54.64	54.64
<b>T=288.15 K</b>						
0.0000	53.64	58.56	60.04	60.33	60.56	60.68
0.1000	56.07	58.02	58.68	58.76	58.74	58.73
0.2000	56.01	57.90	58.58	58.67	58.65	58.64
0.3000	55.81	57.75	58.47	58.57	58.54	58.53
0.4000	55.33	57.54	58.33	58.43	58.40	58.38
0.5000	54.17	56.34	57.49	57.87	57.84	57.82
0.8000	56.26	56.26	56.26	56.26	56.26	56.26
1.0040	50.57	52.76	54.30	54.99	54.99	54.98
<b>T=293.15 K</b>						
0.0000	54.59	59.25	60.48	60.64	60.81	60.91
0.1000	56.32	58.20	58.79	58.91	58.88	58.87
0.2000	56.21	57.98	58.67	58.78	58.74	58.71
0.3000	56.18	58.08	58.73	58.84	58.83	58.82
0.4000	55.62	57.67	58.45	58.58	58.52	58.49
0.5000	54.50	56.54	57.70	58.06	58.02	58.01
0.8000	52.90	54.71	56.00	56.47	56.43	56.42
1.0040	50.90	53.16	54.85	55.25	55.24	55.23
<b>T=298.15 K</b>						
0.0000	55.51	59.63	60.68	60.96	61.09	61.21
0.1000	56.55	58.42	58.92	59.06	59.03	59.02
0.2000	56.40	58.21	58.82	58.95	58.90	58.89

  

$m_{Alanina} \text{ mol} \cdot \text{Kg}^{-1}$	0.0100	0.0300	0.0500	0.0700	0.0900	0.1000
0.3000	56.38	58.22	58.90	58.98	58.96	58.95
0.4000	55.91	57.95	58.68	58.75	58.70	58.66
0.5000	54.80	56.76	57.90	58.23	58.18	58.16
0.8000	53.18	54.90	56.20	56.65	56.60	56.59
1.0040	51.20	53.46	55.06	55.40	55.36	55.36
<b>T= 303.15 K</b>						
0.0000	56.42	60.37	60.94	61.17	61.34	61.47
0.1000	56.98	58.67	59.12	59.27	59.23	59.21
0.2000	56.53	58.40	58.92	59.15	59.10	59.08
0.3000	56.47	58.33	58.99	59.11	59.06	59.04
0.4000	56.20	58.20	58.86	58.95	58.89	58.86
0.5000	55.06	56.92	58.11	58.38	58.32	58.29
0.8000	53.48	55.23	56.40	56.92	56.88	56.85
1.0040	51.56	53.80	55.28	55.62	55.57	55.54
<b>T=308.15 K</b>						
0.0000	57.56	60.73	61.39	61.52	61.73	61.84
0.1000	57.15	58.90	59.42	59.54	59.48	59.45
0.2000	56.70	58.60	59.12	59.33	59.24	59.19
0.3000	56.57	58.47	59.13	59.23	59.15	59.09
0.4000	56.50	58.52	59.14	59.18	59.10	59.07
0.5000	55.47	57.12	58.25	58.60	58.51	58.47
0.8000	53.84	55.53	56.66	57.12	57.07	57.04
1.0040	51.96	54.08	55.58	55.85	55.81	55.79
<b>T=313.15 K</b>						
0.0000	58.46	61.15	61.59	61.86	62.03	62.09
0.1000	57.40	59.06	59.60	59.74	59.66	59.61
0.2000	57.00	58.74	59.26	59.49	59.37	59.30
0.3000	56.73	58.63	59.22	59.32	59.27	59.24
0.4000	56.83	58.68	59.30	59.43	59.34	59.31
0.5000	55.71	57.27	58.42	58.88	58.77	58.69
0.8000	54.22	55.80	56.93	57.39	57.32	57.26
1.0040	52.36	54.37	55.83	56.18	56.11	56.08

**Tabla 3.** Volumen molar aparente límite  $V_{\phi}^0$  de la D-L Alanina en siete solventes pseudobinario a varias temperaturas

Solvente pseudobinario	0.1000	0.2000	0.3000	0.4000	0.5000	0.8000	1.0040
T/K	$V_{\phi}^0 / \text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$						
283.15	58.70	58.61	58.57	58.47	57.88	56.27	54.67
288.15	58.83	58.73	58.67	58.57	58.00	56.39	55.02
293.15	59.01	58.93	58.89	58.79	58.18	56.58	55.30
298.15	59.16	59.09	59.05	58.95	58.40	56.78	55.48
303.15	59.41	59.33	59.26	59.16	58.62	57.07	55.79
308.15	59.75	59.64	59.55	59.45	58.92	57.31	56.00
313.15	60.05	59.92	59.82	59.72	59.31	57.71	56.42

en las mezclas. Según este modelo, el volumen molar aparente límite se puede representar mediante la ecuación (6):

$$\bar{V}_2^0 = \bar{V}_{2int}^0 + \bar{V}_{2elect}^0 \quad (6)$$

donde  $\bar{V}_{2int}^0$  es el volumen molar parcial intrínseco del aminoácido, el cual se puede expresar como la adición del volumen de Van der Waals y el volumen debido al efecto de empaquetamiento y  $\bar{V}_{2elect}^0$  es el volumen de electrostricción. Los valores de  $\bar{V}_{2int}^0$  para los aminoácidos pueden ser obtenidos del volumen molar del cristal utilizando la ecuación (7).<sup>18</sup>

$$\bar{V}_{2int}^0 = \left( \frac{0,7}{0,634} \right) \bar{V}_{cristal}^0 \quad (7)$$

donde  $\bar{V}_{cristal}^0$  es el volumen del cristal y se obtiene dividiendo el peso molecular del cristal por su densidad. Tanto la densidad del sólido y el volumen del cristal se asumen constantes en todo el intervalo de temperatura de trabajo. Pese a que Millero utilizó esta ecuación para aminoácidos en agua, esta ha sido utilizada también en solventes acuosos mixtos.<sup>10</sup> Por ello, a partir de los volúmenes de electrostricción es posible conocer los números de hidratación  $N_H$ :

**Tabla 4.** Volumen molar de transferencia límite  $V_{\phi}^0$  de la D-L Alanina desde el agua pura hasta las soluciones acuosas de [Bmim][BF<sub>4</sub>], a diferentes temperaturas

T/K	283.15	288.15	293.15	298.15	303.15	308.15	313.15
Solvente pseudobinario	$\Delta V_{\phi}^0 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$						
0.1000	-0.37	-0.79	-1.03	-1.09	-1.15	-1.17	-1.15
0.2000	-0.46	-0.89	-1.11	-1.16	-1.23	-1.28	-1.28
0.3000	-0.50	-0.95	-1.15	-1.20	-1.31	-1.37	-1.38
0.4000	-0.60	-1.05	-1.25	-1.30	-1.41	-1.47	-1.48
0.5000	-1.19	-1.62	-1.86	-1.85	-1.94	-2.00	-1.89
0.8000	-2.80	-3.23	-3.46	-3.47	-3.49	-3.61	-3.49
1.0040	-4.40	-4.60	-4.74	-4.77	-4.77	-4.92	-4.78

**Tabla 5.** Números de hidratación  $N_H$  para la D-L Alanina en siete solventes pseudobinario a diferentes temperaturas

T (K)	Solvente pseudobinario							
	0.0000	0.1000	0.2000	0.3000	0.4000	0.5000	0.8000	1.0040
283.15	7.7	8.3	8.3	8.4	8.4	8.6	9.2	9.8
288.15	6.4	7.8	7.8	7.8	7.9	8.1	8.6	9.1
293.15	5.6	7.3	7.3	7.3	7.4	7.6	8.1	8.5
298.15	5.2	6.9	6.9	6.9	6.9	7.1	7.6	8.0
303.15	4.7	6.3	6.3	6.4	6.4	6.5	7.0	7.3
308.15	4.0	5.6	5.7	5.7	5.7	5.9	6.3	6.6
313.15	3.4	4.9	4.9	4.9	5.0	5.1	5.4	5.7

$$\bar{V}_{2elect}^0 = N_H (\bar{V}_E^0 - \bar{V}_B^0) \quad (8)$$

donde  $\bar{V}_E^0$  es el volumen molar del agua en la esfera de hidratación y  $\bar{V}_B^0$  es el volumen molar del agua natural. Los valores de  $(\bar{V}_E^0 - \bar{V}_B^0)$  fueron los mismos utilizados por Páez.<sup>10</sup> De este modo obtuvieron los valores de  $N_H$  los cuales son reportados en la Tabla 5.

El análisis de los resultados mostrados en la Tabla 5 para los  $N_H$  muestra estar en concordancia con el análisis precedente, ya que los números de hidratación incrementan al aumentar la concentración del LI en el solvente pseudobinario y decrecen al incrementarse la temperatura, lo que confirma que un incremento de la temperatura aumenta la deshidratación de las especies solvatadas, mientras que un aumento de la concentración del LI aumenta el efecto de electrostricción del aminoácido sobre las moléculas de agua, lo que disminuye la deshidratación.

## CONCLUSIÓN

Se determinaron los volúmenes molares a aparentes  $V_{\phi}$ , los volúmenes molares aparentes límites  $V_{\phi}^0$ , los volúmenes de transferencia  $\Delta V_{\phi}^0$ , para las soluciones de DL-alanina en mezclas acuosas de tetrafluoroborato de 1-butil-3-metilimidazolio [Bmim][BF<sub>4</sub>] a las temperaturas de (283.15, 288.5, 293.15, 298.15, 303.15, 308.15 y 313.15) K. Se encontró que los valores positivos para  $V_{\phi}^0$  disminuyen conforme aumenta la temperatura del sistema lo cual indica posiblemente un debilitamiento de las interacciones moleculares producto del aumento de la energía cinética. Por otro lado los valores  $\Delta V_{\phi}^0$  muestran un predominio las interacciones entre el grupo metilo de la DL-alanina con los grupos metil, butil y los centros cargados del [Bmim][BF<sub>4</sub>]; así como de los centros cargados de la DL-alanina con los grupos metil y butil del [Bmim][BF<sub>4</sub>]; así mismo, indican que la DL-alanina se comporta como un soluto disruptor de la estructura del solvente en soluciones acuosas de [Bmim][BF<sub>4</sub>]. Finalmente los

números de hidratación sugieren un aumento de la electrostricción conforme se aumenta la presencia del [Bmim][BF<sub>4</sub>] en las mezclas y un efecto de deshidratación conforme se incrementa la temperatura.

## AGRADECIMENTOS

Los autores de este trabajo agradecen a la Universidad de Córdoba por el apoyo financiero para la realización del mismo.

## REFERENCIAS

- Kumar, H.; Singla, M.; Jindal, R.; *Monatsh. Chem.* **2014**, *145*, 1063.
- Banipal, T. S.; Kahlon, G. K.; Kaur, J.; Singh, K.; Mehra, V.; Chawla, R.; Banipal, P. K.; *J. Chem. Eng. Data.* **2010**, *55*, 4864.
- Shekaari, H.; Jebali, F.; *J. Chem. Eng. Data* **2010**, *55*, 2517.
- Faúndez, C. A.; Valderrama, J. O.; *Inf. Tecnol.* **2013**, *24*, 125.
- Valderrama, J. O.; Rojas, R. E.; *Inf. Tecnol.* **2009**, *20*, 149.
- Cortes, E.; Dondero, A.; Aros, H.; Carlesi, C.; *Inf. Tecnol.* **2010**, *21*, 67.
- Gao, H.; Qi, F.; Wang, H.; *J. Chem. Thermodyn.* **2009**, *41*, 888.
- Malham, B.; I. Letellier, P.; Turmine, M.; *J. Phys. Chem. B* **2006**, *110*, 14212.
- Shekaari, H.; Jebali, F.; *J. Solution Chem.* **2010**, *39*, 1409.
- Páez, F.; Páez, M.; Portacio, A.; *Quim. Nova* **2014**, *37*, 418.
- Siddique, J.; Naqvi, S.; *J. Chem. Eng. Dat.* **2010**, *55*, 2930.
- Singha, M.; Pandeya, M.; Kumar, R.; Vermab, H.; *J. Mol. Liq.* **2007**, *135*, 188.
- Rajagopal, K.; Jayabalakrishnan, S.; *Chin. J. Chem. Eng.* **2009**, *17*, 796.
- Palani, R.; Balakrishnan, S.; Arumugam, G.; *Phys. Sci.* **2011**, *22*, 131.
- Banerjee, T.; Kishore, N.; *J. Solution Chem.* **2005**, *34*, 137.
- Millero, F.; Lo Surdo, A.; Shin, C.; *J. Phys. Chem.* **1978**, *82*, 784.
- Choudhary, S.; Kishore, N.; *J. Chem. Thermodyn.* **2011**, *43*, 1541.
- Singh, S.; Kundu, A.; Kishore, N.; *J. Chem. Thermodyn.* **2004**, *36*, 7.