

Conferencia Interdisciplinaria de Avances en Investigación

Introducción

Los coloides son sistemas en los que hay dos o más fases, en donde la fase dispersa se distribuye en la fase continua. Una de estas fases tiene dimensiones muy pequeñas (10^{-9} – 10^{-6} m). Un biocoloide es un sistema de origen biológico, como las bacterias y las levaduras con tamaño coloidal.

La agregación de coloides es un proceso mediante el cual las partículas de la suspensión coloidal se juntan y precipitan. El proceso de agregación es usado en la fermentación, también es usado en el tratamiento de aguas residuales junto con la coagulación y la floculación.

- El objetivo es analizar la agregación de los biocoloides en presencia interfases liquido-vapor.
- La hipótesis planteada es que al momento de confinarse entre interfases los agregados cambian de tamaño.

Material y métodos

La Dinámica Molecular (MD, Molecular Dynamics) es una técnica de simulación computacional que permite estudiar el comportamiento o evolución de un sistema (físico, químico o biológico) por un periodo de tiempo. Al resolver las ecuaciones clásicas de movimiento, se conoce la posición y velocidad de las partículas, lo que puede dar información sobre sus propiedades, como presión, energía potencial, energía cinética, entre otras.

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator, SANDIA), es un código clásico usado en dinámica molecular.

El potencial de interacción se anula cuando la separación es muy grande entre las moléculas, pero cuando moléculas son comprimidas o juntadas fuertemente comienzan a repelerse entre sí, entonces el potencial se incrementa.

Para modelar a los biocoloides se propone un potencial de Lennard-Jones modificado:

$$U(r) = \left[4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) + \frac{A}{r} e^{-\frac{r}{z}} \right] * \frac{1}{T}$$

Donde $U(r)$ es el potencial de interacción, ϵ la profundidad atracción, σ diámetro del coloide, A es un factor que incluye la presencia de iones en el agua, z es otro factor para ponderar la influencia de iones, r es distancia entre los coloides y T temperatura. Cabe mencionar que todas las unidades e los coloides y T temperatura. Cabe mencionar que todas las unidades son unidades reducidas.

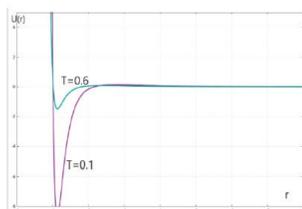


Figura 1. Potencial de interacción para $T_1=0.1$ y $T_6=0.6$ con factor $A=0.25$

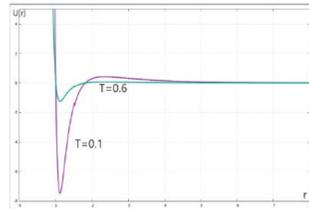


Figura 2. Potencial de interacción para $T_1=0.1$ y $T_6=0.6$ con factor $A=0.50$

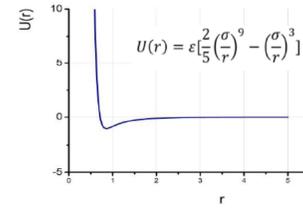


Figura 3. Potencial de interacción partícula-interfase

Resultados

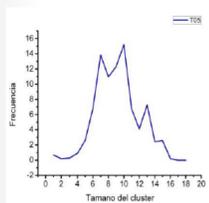


Figura 4. Distribución total tamaño del clúster para 1600 partículas Factor $A=0.25$

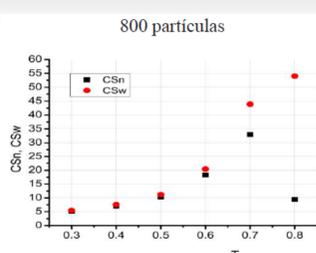


Figura 5. Factor $A=0.25$

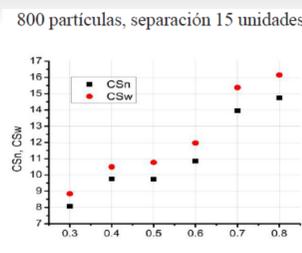


Figura 7. Factor $A=0.25$

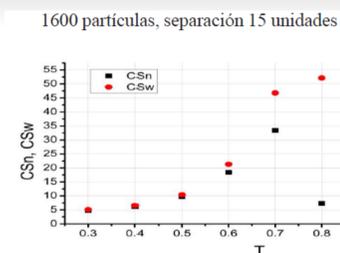


Figura 9. Factor $A=0.25$

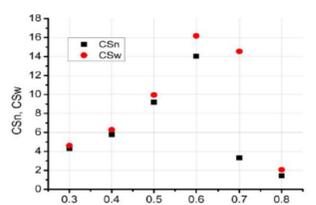


Figura 6. Factor $A=0.50$

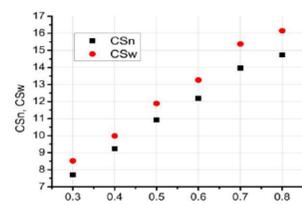


Figura 8. Factor $A=0.50$

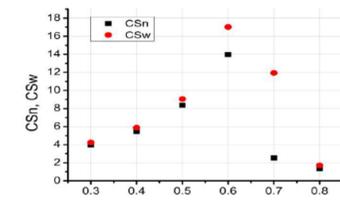


Figura 10. Factor $A=0.50$

Conclusiones

- ✓ El confinamiento disminuye el tamaño del clúster. La densidad es un parámetro importante ya que altera el tamaño del clúster. Se tiene en perspectiva llevar a cabo un análisis de la estructura del clúster.

Bibliografía y referencias

- ✓ Barrow, G. (1987). Química Física (4ta ed.) España: Reverté.
- ✓ Manahan, S. (2006). Introducción a la química ambiental (1ra ed.). México: Reverté.
- ✓ Weber, W. (1979). Control y calidad del agua: procesos fisicoquímicos. España: Reverté.
- ✓ J. Lozano-Aponte, T. Scior (2014). ¿Qué sabe Ud. Acerca sabe de... Dinámica Molecular? Revista Mexicana de Ciencias Farmacéuticas, vol. 45, núm. 1, enero-marzo, 2014, pp. 86-88. <http://www.redalyc.org/pdf/579/57932293010.pdf>
- ✓ Oxford University Press. (2003). Diccionario de Química (1ra reimp.) España: Ibérica Grafic.