

DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES DE SURFACTANTES MEDIANTE TÉCNICAS DE MONTECARLO



FERNANDO GARCÍA CARRILLO

Departament d'Enginyeria Química, Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química
Universitat Rovira i Virgili.

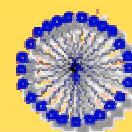
Avinguda dels Països Catalans 26, Campus Sescelades, 43007 Tarragona.

INTRODUCCIÓN

Los surfactantes forman parte de un gran sector de la ingeniería química y los encontramos a menudo en nuestra vida cotidiana (pinturas, tintes, jabones, detergentes, etc.) por ello es muy importante determinar de forma eficiente las propiedades de dichos sistemas. La complejidad que presentan estos sistemas es que tienden a ordenarse formando diferentes fases en función de la concentración y de la temperatura del sistema. Esto hace que la simulación de dichos sistemas sea algo compleja y necesite de tiempos de cálculo muy elevados y de cómputos en paralelo.

OBJETIVO

El objetivo principal de esta investigación es comprobar la eficacia del método *Parallel Tempering* para modelar los sistemas complejos formados



METODOLOGÍA

El método utilizado en esta investigación es la simulación de sistemas de surfactantes en dilución mediante la técnica de *Parallel Tempering* y *Montecarlo*

• Equipo y software y utilizado

Ordenador personal, software desarrollado por el grupo de investigación y un visualizador de sistemas de surfactantes, *RASMOL*®

• *Parallel Tempering*

Las técnicas convencionales utilizadas para la simulación de estos sistemas requieren grandes tiempos de cálculo.

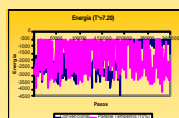
La técnica *Parallel Tempering* utiliza información obtenida de distintas temperaturas para calcular otras a una temperatura más alta, es decir, existe un intercambio de información entre las diferentes temperaturas para las que se ha definido la simulación. De esta manera se aligera el equilibrado del sistema y, a menudo, se requieren menos pasos de cálculo para estabilizar el sistema.

• Interpretación de resultados

Uso de la correlación de la energía, gráficas de energía vs. pasos de cálculo e historiogramas.

RESULTADOS

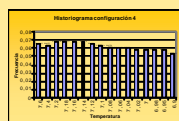
• Bajas concentraciones: 1%



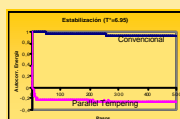
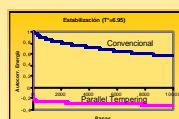
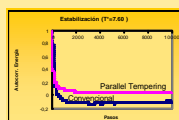
Surfactantes libres



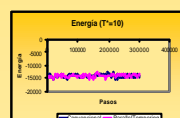
Micela



Buen intercambio de información entre temperaturas



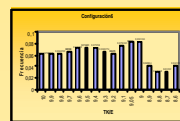
• Altas concentraciones: 12%



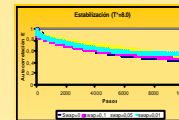
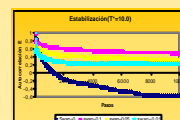
Alta temperatura:
Sistema desordenado



Baja temperatura:
Micelas



Igual que a baja concentración existe un buen intercambio de información entre temperaturas



CONCLUSIONES

• Baja concentración: 1%

La técnica *Parallel Tempering* no tiene mucha ventaja frente a las convencionales para temperaturas altas

La técnica *Parallel Tempering* es mucho más eficiente que las convencionales cuanto más baja es la temperatura

• Alta concentración: 12%

La técnica convencional es más eficiente que la *Parallel Tempering* a temperaturas altas.

A temperaturas bajas no se puede pronosticar diferencias en la eficacia de las técnicas, harían falta realizar simulaciones más largas para extraer una conclusión sólida.