



SOCIEDAD QUÍMICA  
DE MÉXICO, A.C.

## **Autoagregación de Moléculas Surfactantes en interfases: líquido/líquido y líquido/sólido.**

Héctor Domínguez-Castro  
Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM

Dada las características de las moléculas surfactantes estas tienen la propiedad de autoensamblarse formando agregados moleculares de diferentes formas, esferas, cilindros, bicapas, etc. Sin embargo, los agregados pueden presentar formas diferentes cuando están en bulto o cuando están en presencia de superficies sólidas. La forma en que interaccionan y en la que se arreglan depende tanto de las interacciones surfactante-surfactante, surfactante-agua (solvente) y en el caso de superficies sólidas de la interacción surfactante-superficie. Así entonces, estudiar desde un punto de vista atómico-molecular como se comportan los surfactantes en diferentes condiciones sería de gran ayuda para entender mejor problemas no solo de interés científico si no también problemas de aplicación industrial. Por ejemplo, los surfactantes son usados en la industria farmacéutica para encapsulamiento y acarreamiento de fármacos; en la industria de las pinturas como mecanismos de homogenización del pigmento; en la industria de contaminantes como retenedores de pesticidas y partículas metálicas y en la industria del petróleo, para la extracción del crudo en las etapas secundarias del mismo.

La mayoría de los estudios sobre surfactantes son realizados en un laboratorio en donde existen al momento una gran cantidad de técnicas que permiten conocer y caracterizar sus propiedades químicas, termodinámicas y estructurales. Sin embargo, con la aparición de las computadoras, hoy en día, es posible realizar experimentos computacionales que nos ayudan a entender a un nivel atómico-molecular el comportamiento de los surfactantes. Así entonces, es posible tener mas información y en su caso complementar los experimentos con las simulaciones por computadora. En este trabajo se presenta como las simulaciones computacionales pueden ser una herramienta poderosa para estudiar sistemas complejos como lo son las moléculas surfactantes en diferentes interfases

Mérida-Yucatán Septiembre-2014