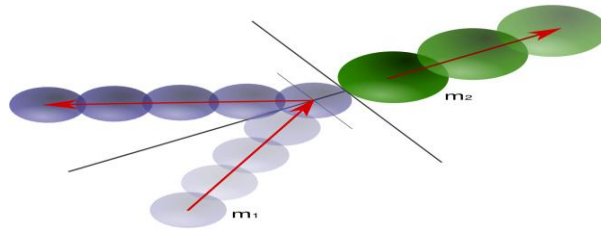


# BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA



## INSTITUTO DE FÍSICA “Luis Rivera Terrazas” SEMINARIO “DR. JESUS REYES CORONA”



### “Modelado de la dependencia de la tensión interfacial con la temperatura de solventes orgánicos y soluciones acuosas mediante dinámica de partículas disipativas electrostática”

Dra. Estela Mayoral Villa  
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ).

La tensión interfacial  $\gamma$  entre dos líquidos inmiscibles es una propiedad termodinámica fundamental que determina la hidrodinámica y la morfología de sistemas multifásicos. La variación de la tensión interfacial como función de distintas propiedades del medio, es importante en distintas aplicaciones industriales, por ejemplo en los procesos de extracción de petróleo, entre otras. El conocimiento de cómo varía esta cantidad a distintas temperaturas  $T$  es fundamental para el adecuado diseño de distintos procesos productivos. Los resultados experimentales han mostrado que  $\gamma$  comúnmente decrece linealmente con  $T$ , sin embargo los valores precisos de  $d\gamma/dT$  son difíciles de obtener experimentalmente pues esta cantidad es particularmente pequeña (menor a  $10^{-2}$  [dyne/cm°C]). En este trabajo se presenta el estudio de la tensión interfacial entre solventes orgánicos y agua a diferentes temperaturas empleando simulaciones mesoscópicas de dinámica de partículas disipativas (DPD). El efecto de la temperatura en el parámetro de interacción repulsivo DPD  $\alpha_{ij}$  para distintos componentes es obtenido a partir de la dependencia de los parámetros de Flory-Huggins  $\chi_{ij}$  con la temperatura mediante los parámetros de solubilidad  $\delta$  de los componentes puros. Para la obtención de los  $\chi(T)$ , se llevaron a cabo simulaciones atomísticas para los componentes variando la temperatura y obteniéndose la densidad de energía cohesiva. Con ello se estimaron los parámetros  $\chi$  y a partir de éstos, los coeficientes  $\alpha_{ij}$ . La parametrización se validó a través del estudio de la tensión interfacial en mezclas de benceno/agua y ciclohexano/agua. Las predicciones de nuestras simulaciones se compararon con los resultados experimentales reportados para estos sistemas obteniendo una excelente correspondencia entre ambos. Adicionalmente, la ley de escalamiento obtenida del modelo de Guggenheim-Katayama-van del Waals emerge con un exponente crítico  $\mu \sim 1$ . Ello muestra que los parámetros de solubilidad a diferentes temperaturas como vía para obtener los parámetros DPD es una buena alternativa para introducir el efecto de la temperatura en estos.

**Auditorio-IFUAP**

**Viernes 08 de Febrero de 2013**

**13:00 Hrs.**