

Informe de actividades

Dr. Héctor Domínguez Castro

Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM

Dinámica Molecular de Moléculas Anfifílicas.

2016

Resumen.

Usando la técnica de dinámica molecular se llevaron a cabo estudios de moléculas anfifílicas para estudiar la formación de agregados micelares en diferentes interfases y sobre superficies sólidas. Se realizaron pruebas de sistemas simples sobre sustratos sólidos para ver la interacción de las superficies con diferentes moléculas. Se realizaron simulaciones a diferentes condiciones termodinámicas y con diferentes surfactantes y se observó como estas condiciones influían en la formación y en la interacción de los surfactantes con otras moléculas o con diferentes superficies.

Descripción.

Dadas las propiedades de las moléculas anfifílicas están forman micelas en fases de bulto. Dichas micelas pueden tener diferentes estructuras dependiendo de las condiciones termodinámicas y tamaños de las moléculas. Sin embargo, la formación de estos agregados también pueden ser distintos cuando las moléculas surfactantes se encuentran cerca de paredes sólidas o pueden verse alterados cuando están interaccionando con otras moléculas.

En este proyecto hemos estudiando como diferentes surfactantes, de acuerdo a su cabeza polar, pueden tener diferentes formas cuando se depositan en superficies sólidas. Incluso

dependiendo de la naturaleza de la superficie (hidrofílica o hidrofóbica) la forma del agregado se ve modificado como lo muestran nuestras simulaciones.

También dadas las propiedades de estas moléculas anfifílicas se han usado para retener partículas contaminantes y de las presentes simulaciones se ha podido determinar en que lugar se colocan. Dependiendo del grupo polar del surfactante y de la naturaleza de las partículas contaminantes estas últimas se pueden depositar por dentro o por fuera del agregado micelar formado.

Todos estos estudios nos han ayudado a entender mejor como los surfactantes, dependiendo su cabeza polar, se autoagregan en diferentes interfases y como pueden ser usados para interactuar con otras partículas mas pequeñas.

Cálculos

Mediante un método de Monte Carlo Reactivo se estudio una reacción química para investigar la adsorción de gases sobre una interfase sólida como un modelo de retención de CO₂ sobre diferentes estructuras sólidas. Se determino que la estructura del sustrato sólido puede influir en la cantidad de gas que se adsorbe.

Se realizaron estudios del surfactante sulfato de sodio dodecil depositados sobre diferentes superficies solidas (grafito, dióxido de silicio y dióxido de titanio) y se llevaron a cabo estudios de cómo este tensoactivo puede usarse como retenedor de moléculas contaminantes como el fenol. Se observo como las moléculas de fenol se depositan sobre los agregados de surfactante por dentro de la micela que se forma sobre las superficies sólidas.

Se hicieron también estudios de diferentes surfactantes, aniónicos y noiónicos, sobre una superficie sólida para determinar cual es el efecto de la cabeza polar de los tensoactivos en la formación de agregados moleculares. Mediante estudios estructurales se determino que el surfactante SDS formo micelas semiesféricas mientras que el surfactante SPAN80 formo micelas cilíndricas sobre una superficie de dióxido de silicio.

También se estudio la formación de estructuras micelares mediante el uso de alcoholes.

Se usaron alcoholes de diferentes cadenas para ver como estas influyen en la formación de micelas en soluciones acuosas y de las simulaciones se pudo observar como la micela del surfactante cambia en su estructura al aumentar la concentración de alcohol

Para todas las investigaciones se realizan varias simulaciones usando miles de átomos usando modelos de átomo unido (united atom, UA) y de todos los átomos (all atom, AA).

Software

Las simulaciones se llevaron a cabo usando nuestros propios códigos y códigos abiertos como gromacs y DLPOLY, de dinámica molecular, para hacer corridas en paralelo y por varios nanosegundos.

Artículos

Como resultado de estas investigaciones se produjeron las siguientes publicaciones.

José G. Méndez-Bermúdez, Hector Dominguez, László Pusztai, Sándor Guba, Barnabás Horváth, István Szalai, “Composition and temperature dependence of the dielectric constant of 1-propanol/water mixtures: Experiment and molecular dynamics simulations”. J. Molec. Liq. 219, 354, 2016.

H. Dominguez. “Molecular dynamics simulations to study the solvent influence on protein structure”. Chem. Phys. Lett. 651, 92, 2016.

Deneb Peredo-Mancilla, Hector Dominguez, “Adsorption of phenol molecules by sodium dodecyl sulfate (SDS) surfactants deposited on solid surfaces: A computer simulation study”, J. Molec. Graph. Model. 65, 108, 2016.

E. Nuñez-Rojas and H. Dominguez., “Computational studies on the behaviour of anionic and nonionic surfactants at the SiO_2 (Silicon dioxide)/water interface”. *Cond. Matt. Phys.* 19, 13602:1-8, 2016.

J.G. Mendez-Bermudez and H. Dominguez., “Structural changes of a sodium dodecyl sulfate (SDS) micelle induced by alcohol molecules” . *J. Mol. Model.* 22, 23, 2016.

M. Lara-Pena and H. Dominguez., “A computational model of an Einstein-Solid model to study gas sorption in solid surfaces: effects on the solid wall structure”. *Rev. Mex. Fis.* 62, 510, 2016.