



## **ESTUDIO COMPUTACIONAL DEL EFECTO DE LA TEMPERATURA SOBRE EL MECANISMO DE AGREGACIÓN DE PARTÍCULAS COLOIDALES A CORTO ALCANCE UTILIZANDO EL MODELO PAC**

Leticia Hernández Mauro<sup>1</sup>, Miguel Ángel Vaca Hernández<sup>2</sup>, María de la luz Delgadillo Torres<sup>2</sup> y Mariana Bárcenas Castañeda<sup>2</sup>

1 Universidad Tecnológica Fidel Velázquez, 2 Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec.  
letyh84@yahoo.com.mx

El estudio de agregación coloidal ha sido de gran interés para diversas áreas científicas para el desarrollo de ciencia básica, nuevos procedimientos y nuevos materiales. En particular el estudio de agregación de algunas biomoléculas y/o partículas coloidales como las nanopartículas, se han enfocado en aportar conocimientos sobre el mecanismo de agregación coloidal y su control, con el objetivo de desarrollar nuevos inhibidores-dispersantes. En este sentido, se han propuesto diversos modelos teóricos para la predicción del mecanismo de agregación, los cuales se pueden dividir ampliamente en dos categorías: enfoques estadísticos y modelos basados en la física complementados con simulación molecular. En el presente trabajo, se realiza el estudio generalizado del mecanismo de agregación de partículas coloidales en presencia de inhibidores mediante el modelo PAC (control de aglomeración de partículas) para corto alcance. Se estudia el efecto de la temperatura sobre el mecanismo de agregación coloidal con una concentración de inhibidores  $K=1.5$ , a un alcance del potencial de interacción coloidal de  $l=1.15$ . Se reporta el proceso de agregación en función del tamaño promedio de agregado ( $Z$ ), complementado con un análisis de la distribución de frecuencia normalizada de agregados coloidales (NFD), fracción de monómeros ( $X_0$ ) y función de distribución radial ( $g(r)$ ). Los resultados muestran que a temperaturas altas disminuye la agregación coloidal, viéndose reflejado en la disminución del tamaño promedio de agregado y en consecuencia una mayor cantidad de monómeros en suspensión, efecto contrario a temperaturas bajas. Además, se observa un máximo en el comportamiento del tamaño promedio de agregado respecto a la temperatura, donde a una temperatura muy baja la agregación disminuye. Dicho comportamiento puede atribuirse a que el inhibidor, ciertas concentraciones, provoca la formación de agregados a ciertas temperaturas en lugar de inhibir la aglomeración.