

Simulan en computadora nuevos materiales contra la contaminación

Con el objetivo de contribuir en el combate contra la contaminación, el doctor Héctor Domínguez Castro, investigador del Instituto de Investigaciones en Materiales de la Universidad Nacional Autónoma de México, se dio a la tarea de indagar sobre las propiedades de los surfactantes —agentes químicos activos con la capacidad de reducir la tensión superficial de un fluido—, para retener partículas contaminantes presentes en el agua o en superficies sólidas.

Los surfactantes o tensoactivos, como también se les conoce, cuentan por naturaleza con una cabeza polar (afín al agua) y una cola hidrofóbica (a la que no le gusta el agua), lo que les permite tener mayor afinidad a ciertas moléculas que a otras. “A partir de ese principio básico, estamos realizando simulaciones computacionales para tratar de definir su potencial, de retener agentes contaminantes específicos. Observamos la estructura de una molécula, vemos cómo funciona y hacemos una simulación computacional a nivel molecular, a través de una técnica llamada dinámica molecular, mediante la cual resolvemos las ecuaciones de movimiento de las moléculas surfactantes con todas las que interactúan a su alrededor, por ejemplo, de agua y de los propios agentes contaminantes”.

Esta investigación ha comenzado con la modelación de partículas metálicas de cadmio (Cd), plomo (Pb) y moléculas orgánicas como el fenol; es una línea en la que ya se tiene tiempo trabajando y comenzó analizando las propiedades hidrofóbicas e hidrofílicas de las moléculas surfactantes, es decir, a las que les gusta el agua y a las que no. Fue así como al doctor Héctor Domínguez

se le ocurrió investigar si esa propiedad podría aprovecharse para atrapar, de manera selectiva, partículas contaminantes dentro y fuera del agua, “así como la mugre es atrapada por los jabones, cremos que las moléculas contaminantes pueden ser atrapadas por los surfactantes”.

El proyecto arrancó con simulaciones sencillas de moléculas modelo, en una primera instancia para probar la técnica; una vez que se identificó que ésta tenía potencial, se comenzó con el uso de partículas de Cd, para las cuales se hicieron las simulaciones correspondientes en medios acuosos en la primera etapa, y para superficies sólidas en la segunda.

A esa fase del proyecto se sumaron nuevas simulaciones para otras partículas, como dióxido de carbono (CO₂), con la que se están realizando modelos con diferentes tipos de surfactantes con el objetivo de encontrar el más efectivo para retener dichas partículas. Derivado de ese trabajo, el principal hallazgo radica en que existen surfactantes que sí cuentan con gran potencial para retener partículas contaminantes, “incluso son mucho más eficientes y menos costosos que los métodos tradicionales; no obstante, estamos en una etapa en la que continuaremos probando estos resultados con otro tipo de moléculas. Debemos precisar que esto se ha probado a través de simulaciones y que estamos dando los primeros pasos para corroborar nuestros resultados en laboratorio”.

Fuente:

Conacyt Prensa, <http://www.conacytprensa.mx/index.php/ciencia/ambiente/17849-modelos-computo-materiales-contaminacion>

