

Simulación por dinámica molecular de procesos de micelización en modelos moleculares de ‘grano grueso’

T. Ruiz-Herrero* y E. Velasco

Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid

En los últimos años ha comenzado a ser posible abordar el estudio de soluciones de moléculas anfifílicas en agua mediante técnicas de simulaciones por ordenador. A pesar de ello, los modelos atomísticos de interacción se encuentran aún lejos de poder predecir los comportamientos termodinámicos y estructurales de sistemas realistas, y los modelos de ‘grano grueso’, que atienden a las propiedades básicas de las moléculas, y no a sus detalles químicos, están jugando un papel muy importante.

En esta contribución analizamos un modelo sencillo, propuesto anteriormente y estudiado mediante técnicas del funcional de la densidad¹, utilizando simulación por ordenador con el método de dinámica molecular. El modelo de interacción no tiene en cuenta explícitamente el solvente (agua), salvo a través de términos en la interacción entre dos moléculas anfifílicas que simulan la interacción hidrofóbica; de esta manera es posible estudiar fenómenos de agregación utilizando sistemas con un número de moléculas relativamente grande. La forma molecular de las partículas se supone esférica, si bien hemos considerado asimismo formas moleculares alargadas con asimetría ‘cabeza–cola’, en la línea de los modelos propuestos por Cleaver y colaboradores².

Nuestros resultados preliminares (Fig. 1) se centran en el proceso de formación de micelas (micelización), es decir, de agregados esféricos en promedio en los que la interacción hidrofóbica se optimiza a base de maximizar el contacto entre ‘colas’ en regiones separadas del ‘agua’ (vacío en el modelo) a través de una corona esférica de ‘cabezas’. Hemos estudiado la dependencia de la concentración micelar crítica (a la que aparece de manera espontánea un gran número de micelas) con la intensidad de la interacción hidrofóbica. Asimismo, hemos analizado la distribución de micelas en cuanto a sus tamaños y

formas, y estudiado la cinética de agregación. Por último, hemos explorado el régimen de alta concentración, en el cual la interacción entre micelas es importante, y aventuramos un escenario con respecto a la estabilidad de las posibles estructuras en este régimen.

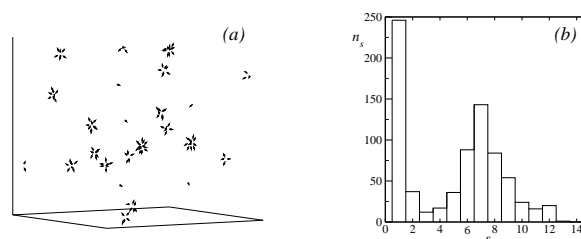


Figura 1. (a) Subregión de la celda de simulación donde se pueden observar varias micelas en equilibrio con moléculas anfifílicas aisladas. (b) Histograma que muestra el número de clusters n_s en función del tamaño del cluster s para concentración de moléculas anfifílicas por encima de la concentración crítica. Se observa una distribución bimodal con un máximo secundario alrededor de $s = 7$, que sería el tamaño medio de una micela.

* teresa.ruiz@uam.es

¹ A. M. Somoza, E. Chacón, L. Mederos y P. Tarazona, *A model for membranes, vesicles and micelles in amphiphilic systems*, J. Phys. Condens. Matter **7**, 5753 (1995).

² F. Barmes, M. Ricci, C. Zannoni y D. J. Cleaver, *Computer simulations of hard pear-shaped particles*, Phys. Rev. E **68**, 021708 (2003).