

## **Efecto de la concentración y de superficie sobre las funciones de material de soluciones poliméricas, en flujo de corte simple, mediante simulación molecular fuera del equilibrio**

Herrera González I.<sup>1</sup>, Castillo Tejas J.<sup>1\*</sup>, Alvarado J. F. J.<sup>2</sup>, Manero O.<sup>3</sup> y Luna Barcenás G.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito S/N, Apizaco, Tlaxcala, 90300 México.

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Química, Instituto Tecnológico de Celaya, Avenida Tecnológico y García Cubas S/N, Celaya, Guanajuato, 38010 México.

<sup>3</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), México, D. F., 04510 México.

<sup>4</sup>Centro de Investigación y Estudios Avanzados (CINVESTAV) del Instituto Politécnico Nacional (IPN), Unidad Querétaro, Libramiento Norponiente No. 2000 Fraccionamiento Real de Juriquilla, Querétaro, Querétaro, 76230 México.

\*e-mail: jcastillotejas@yahoo.com.mx

### **1. Resumen**

En este trabajo se utiliza la Dinámica Molecular de No Equilibrio para estudiar el comportamiento reológico de soluciones poliméricas de distinta concentración, en condiciones de flujo de corte simple del tipo Couette. Para reproducir una cadena lineal se utiliza el modelo molecular Monómero-Resorte, el cual, la describe como una colección de segmentos conectados por enlaces no armónicos tipo FENE. La pared se simula con un potencial de superficie con distintos grados de atracción. El flujo se genera moviendo la pared superior a una tasa de corte impuesta. Para el intervalo de tasas de corte analizadas y a las condiciones de la simulación se puede establecer que la superficie induce modificaciones en las propiedades estructurales y en el perfil de velocidad. Estas modificaciones dependen de la concentración de la solución y del grado de atracción de la pared. Asimismo se presentan fenómenos de deslizamiento fluido-fluido.

### **2. Introducción**

Las técnicas de simulación molecular (SM) han sido empleadas para estudiar las propiedades de transporte y estructurales de fluidos complejos como son los polímeros [1-4]. La principal ventaja de las técnicas SM es la posibilidad de estimar propiedades reológicas, en condiciones difíciles de alcanzar experimentalmente. Recientemente, Moore y col. [3] simularon un flujo de corte a tasas de corte de  $\dot{\gamma} \geq 10^8 \text{ s}^{-1}$ , a tales condiciones de lubricación, no existen datos experimentales reportados. A la fecha, la mayoría de los estudios con SM se han realizado considerando polímeros fundidos. En este trabajo se utiliza la dinámica molecular para estudiar el flujo de corte simple de soluciones de moléculas lineales.

### 3. Metodología

#### 3.1 Potencial intermolecular

Los sistemas en estudio están formados por moléculas de cadena lineal inmersas en partículas de solvente. Una partícula de solvente es representada por una esfera (sitio) suave tipo Lennard-Jones de tamaño  $\sigma$ . Una molécula de cadena lineal es descrita por el modelo monómero-resorte de Kremer y Grest [5], donde, una colección de cinco segmentos (sitios), de tamaño  $\sigma$ , están conectados entre sí por medio de resortes no armónicos tipo FENE. Las interacciones de no enlace entre las partículas del sistema están dadas por un potencial LJ (12-6). Para la interacción entre los sitios y la pared se utiliza un potencial atractivo dado por  $U_w(z_s) = \varepsilon_{wf} [\exp(-2\alpha z_s) - 2\exp(-\alpha z_s)]$ , donde,  $\varepsilon_{wf}$  es la fuerza de atracción de la pared y  $z_s$  es la distancia entre un sitio y la pared. El tamaño del sistema  $N$ , incluyendo moléculas y solventes, fue de 3000 sitios a concentraciones de 0.05, 0.10 y 0.20.

#### 3.3 Detalles de la simulación

El sistema evoluciona con el tiempo acorde con las ecuaciones de movimiento de Newton. En la solución de dichas ecuaciones se utiliza un integrador reversible *RESPA* donde el paso de integración asociado a las variables dinámicas del termostato es igual al del sistema de referencia. En flujo de corte simple del tipo Couette, el campo de velocidad es generado por el movimiento de la superficie superior. En este trabajo, el sistema en estudio está confinado entre dos placas de tipo atractivo, la inferior está fija y la superior se mueve con una velocidad  $u_0 = \gamma L_z$ , donde,  $\gamma$  es la tasa de corte impuesta y  $L_z$  es la distancia de separación entre las placas. A menos que se indique lo contrario, todos los resultados de las simulaciones se expresan en unidades reducidas cuyas cantidades básicas son las siguientes:  $\sigma$ ,  $\varepsilon$  y  $m_i$ . La configuración inicial de la solución de moléculas lineales se generó utilizando una dinámica molecular de equilibrio (DME) en ausencia de perturbaciones. El tiempo de estas simulaciones se fijó en 10,000 con un  $\Delta t = 0.001$ . Asimismo, el tiempo para las simulaciones de no equilibrio fue de 20,000.

#### 4. Resultados y discusión

En la Figura 1a y 1b se muestra el perfil de densidad y radio de giro  $R_g$  como una función de la distancia de confinamiento a tasas de corte de 0.005, 0.1 y 1.0, y los dos tipos de superficie para una solución al 20 %. En la Figura 1a se observa que al acercarse a las paredes, las partículas se ordenan en forma de placas con dependencia del tipo de pared y en la región central se reproduce un comportamiento de bulto. Con base en la Figura 1b se puede establecer que al aumentar la tasa de corte, las moléculas son deformadas en dirección del flujo y que esta deformación no depende del tipo de pared.

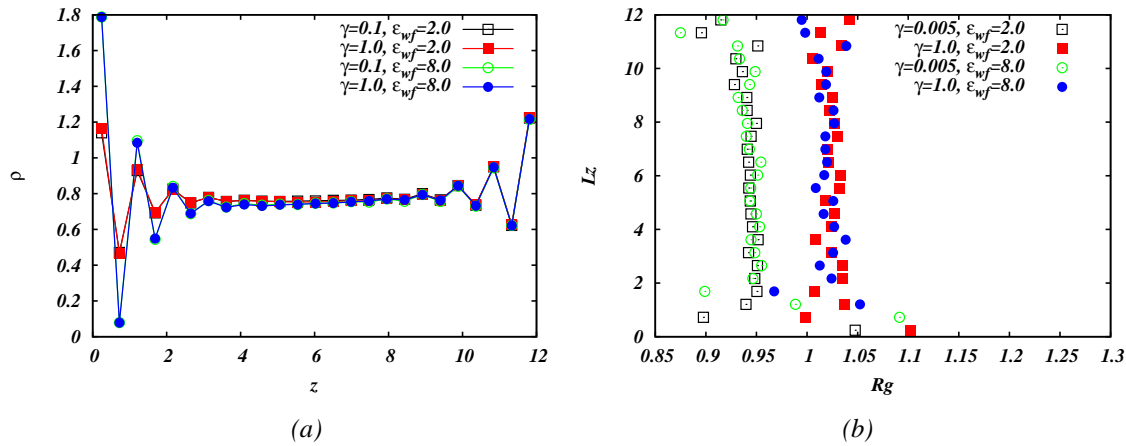


Figura 1. (a) Variación de la densidad  $\rho$  y (b) del radio de giro  $R_g$  como una función de la distancia de confinamiento.

En la Figura 2a se presenta el perfil de velocidad como una función de la distancia de confinamiento. Para las tasas de corte analizadas, el fluido exhibe una condición de no deslizamiento fluido-pared, sin embargo, para una tasa de corte de 2.0 el sistema presenta una condición de deslizamiento fluido-fluido. Este tipo de deslizamiento únicamente se observó cuando la pared tiene un grado de atracción  $\varepsilon_{wf} = 8$ . En la Figura 2b se muestra la variación de la viscosidad  $\eta$  como una función de  $\gamma$ , tal que, para el intervalo de tasas analizadas el fluido exhibe un comportamiento *casi* Newtoniano.

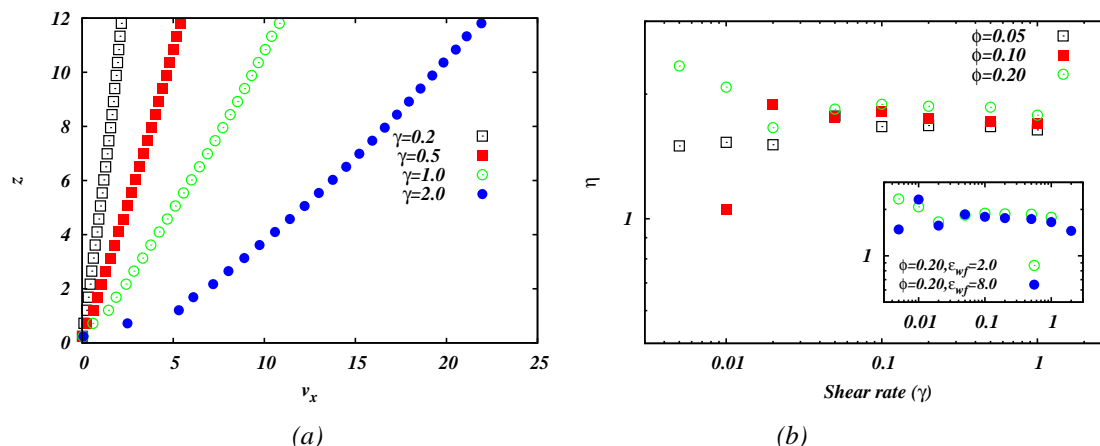


Figura 2. (a) Perfil de velocidad  $v_x(z)$  y (b) Variación de la viscosidad de corte  $\eta$  como una función de la tasa de corte  $\gamma$ .

## 5. Conclusiones

Con base a los resultados se puede establecer:

1. Que el grado de atracción de la superficie no afecta las propiedades estructurales como el radio de giro y la densidad; y las funciones de material como la viscosidad. Lo anterior puede estar asociado al tamaño de la molécula lineal.
2. A altas tasas de corte y para paredes muy atractivas, el fluido exhibe una condición de deslizamiento fluido-fluido.

## Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo económico otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología: Convenio 47192.

## 6. Referencias.

- [1] A. Jabbarzadeh, J. Atkinson, y R. Tanner, *Macromolecules* **36**, 5020 (2003).
- [2] L. Kioupis y E. Magín, *J. Phys. Chem. B* **104**, 7774 (2000).
- [3] J. Moore, S. Cui, H. Cochran, y P. Cummings, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **93**, 83 (2000).
- [4] J. Moore, S. Cui, H. Cochran, y P. Cummings, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **93**, 101 (2000).
- [5] K. Kremer y G. Grest, *J. of Chem. Phys.* **92**, 5057 (1990).