



**CICLO DE SEMINARIOS 2016-2017**  
**DEPARTAMENTO DE QUIMICA-FÍSICA I**  
**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**

**Lunes 20 de Febrero de 2017 – 13:00 h**  
**Sala de la Biblioteca**

---

## **Tensión Interfacial de Mezclas Fluidas: Determinación Experimental, Modelación Teórica y Simulación Molecular**

**Andrés Mejía**

*Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Concepción, Chile*

---

El análisis y la descripción del comportamiento de la tensión interfacial entre fases de mezclas fluidas es un tópico relevante en áreas de investigación científica, en el desarrollo de numerosos procesos de aplicación tecnológica y en el análisis de la potencialidad de nuevos procesos destinados al tratamiento o desarrollo de productos naturales. Por ejemplo, la magnitud de la tensión interfacial gobierna la extracción ternaria de petróleo, es fundamental en la formulación de combustibles oxigenados, así como de biocombustibles y juega un rol fundamental en la remediación de sistemas acuosos.

La determinación de la magnitud de la tensión interfacial en términos de la temperatura, presión y composición de la mezcla puede realizarse mediante tensiometría, modelos teóricos y simulación molecular. Sin embargo, la aplicación de un único enfoque no es suficiente para obtener una completa descripción del comportamiento de la tensión. En efecto, la experimentación es costosa, requiere mucho tiempo y sus resultados necesitan ser validados, especialmente a condiciones extremas de presión y temperatura. Por su parte, los modelos teóricos y la simulación molecular requieren, en algunos casos, ser parametrizados mediante información experimental y sus resultados deben ser verificados.

A partir de lo anterior es posible concluir que una completa descripción del comportamiento interfacial requiere una combinación racional de estos tres enfoques. La teoría puede ser utilizada como guía para realizar experimentación y simulación molecular. En cambio, las medidas experimentales pueden ser utilizadas para validar los resultados obtenidos desde modelos teóricos y de simulación. Complementariamente, la teoría y la simulación pueden ser utilizadas para interpretar los resultados experimentales, así como para extrapolarlos a condiciones extremas donde no es posible llevar a cabo experimentación.

En esta exposición se presentan las principales técnicas experimentales, los métodos teóricos y las técnicas de simulación molecular que han sido utilizadas, de forma simultánea, en la cuantificación de la tensión interfacial en mezclas de relevancia tecnológica, así como medio ambiental.