



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

Bases Moleculares de las Transiciones Morfológicas en Micelas de Surfactantes Producidas por el Encapsulamiento de Moléculas No-polares

Zaldivar, Gervasio¹, Conda-Sheridan, Martin² y Tagliazucchi, Mario¹.

1. Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física. Buenos Aires, Argentina y INQUIMAE/CONICET 2. Department of Pharmaceutical Sciences, College of Pharmacy, University of Nebraska Medical Center, Omaha, NE 68198-6125, USA. Email: zaldivar.gervasio@gmail.com

Los surfactantes viscoelásticos son moléculas anfifílicas que pueden autoensamblarse en micelas cilíndricas flexibles (*wormlike micelles*). El entrelazamiento de estas micelas le otorga a la solución una alta viscosidad y/o propiedades elásticas. Las micelas cilíndricas pueden además romperse y reformarse debido a fluctuaciones térmicas. Los surfactantes viscoelásticos son empleados como agentes promotores de viscosidad en cosmética y fluidos de fractura en la industria del petróleo. En estas aplicaciones, los surfactantes interactúan muchas veces con moléculas no-polares, lo cual resulta en cambios morfológicos de los agregados y en las propiedades reológicas de la solución. Se ha observado que los aditivos no-polares producen un acortamiento de las micelas cilíndricas y, posteriormente, inducen una transición a micelas esféricas.

En este trabajo, estudiamos teóricamente la co-agregación del surfactante catiónico CTAB con aditivos no-polares.[1] Empleamos una teoría molecular que provee información termodinámica (incluida la energía de corte) y detalle estructural del sistema (ubicación, conformación y orientación de los componentes). Empleando la teoría molecular, predijimos el diagrama de morfología del sistema y la energía de corte de las micelas cilíndricas en función del largo, hidrofobicidad y contenido del aditivo no-polar. Observamos un buen acuerdo entre estas predicciones y medidas experimentales en la literatura. En general los aditivos se ubican preferentemente en las terminaciones hemisféricas de las micelas, lo cual resulta en una disminución de la energía de corte y, por lo tanto, en un acortamiento de las micelas, tal como se observa en los experimentos. Sin embargo, los detalles mecánicos de esta transición dependen fuertemente de la distribución del aditivo dentro de los agregados. Por ejemplo, dependiendo de su hidrofobicidad, los aditivos pueden ubicarse en el núcleo micelar o en la interface núcleo/corona. Estas distribuciones dan lugar a diferentes mecanismos para el acortamiento de la longitud de las micelas cilíndricas y su eventual transición a micelas esférica con el aumento de la concentración de aditivo.

Referencias

- 1) Zaldivar, G., Conda-Sheridan, M., Tagliazucchi, M., *Langmuir* **2021**, 37, 3093–3103, DOI: 10.1021/acs.langmuir.0c03421.

