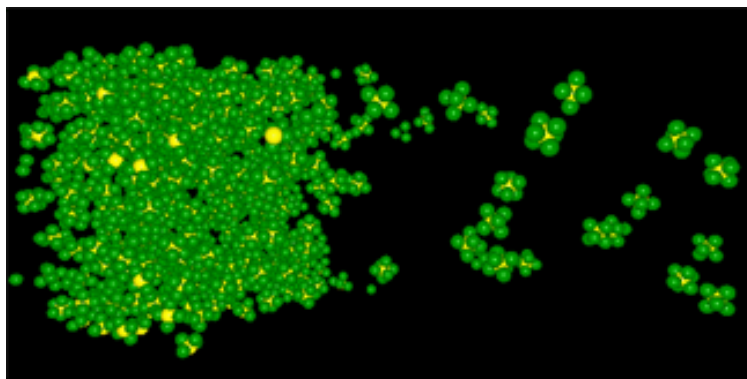


02/2006

Un modelo molecular que perfecciona procesos industriales



Lograr que un proceso industrial sea óptimo, seguro y limpio es un tanto complejo. Depende de varios factores tanto externos como los que se escapan a nuestros ojos. Investigadores de la UAB intervienen en este nivel y siguen de cerca los fenómenos físico-químicos de los materiales industriales. En concreto, intentan crear un modelo molecular que prevea la actividad del SF₆, un gas sintético de mucha utilidad en la industria.

El grup de simulació molecular de l'ICMAB-CSIC, situat al campus de la UAB, acaba de publicar un treball de recerca sobre l'aplicació de la dinàmica molecular a l'estudi de la molècula de hexafluorur de sofre. L'hexafluorur de sofre o SF₆ és un gas sintètic. L'estructura de la molècula és octaèdrica, amb sis àtoms de fluor situats simètricament entorn a un àtom central de sofre. SF₆ té moltes aplicacions a l'indústria degut a la seva elevada estabilitat química i també per les seves propietats dielèctriques. D'entre el 90 i 95% de la seva producció es fa servir a l'indústria elèctrica i com gas aïllant en dispositius electromecànics i línies de transmissió. SF₆ es fa servir, tanmateix, en processos d'obtenció d'alumini i magnesi, en la manufactura de semiconductors i d'altres aplicacions més sofisticades, com ara, aïllant termoacústic de finestres, i solvent inert en reaccions en fluids supercrítics. Per últim, SF₆ es fa servir en tecnologia mèdica, per exemple, com a agent de contrast en ultrasonografies i com a gas inert en operacions oftalmològiques i d'altres tractaments mèdics.

Olivet, Duque i Vega van presentar en aquest treball simulacions de dinàmica molecular per a comprovar la precisió d'un model rígid per a predir l'equilibri líquid-vapor i la tensió superficial d'aquest compost, comparat amb dades experimentals. La mateixa eina es va fer

servir per a obtenir els coeficients de transport del compost a pressió atmosfèrica i a diferents temperatures. Les conclusions més rellevants d'aquest estudi són que per a obtenir prediccions quantitatives de les propietats termodinàmiques del SF₆ és imprescindible considerar un model flexible, mentre que les propietats dinàmiques son menys sensibles a la vibració dels àtoms en aquestes condicions. El grup està treballant en el desenvolupament d'un model més fiable per proporcionar prediccions quantitatives de diverses propietats termodinàmiques, de transport i elèctriques.

L'interès d'aquest estudi està relacionat amb la necessitat de desenvolupar eines fiables per avançar en l'enteniment de la relació entre les propietats microscòpiques d'un compost i el seu comportament macroscòpic. De fet, els models moleculars son necessaris, i molts cops, imprescindibles, per entendre certs fenòmens físico-químics que tenen lloc en molts processos industrials, i poder així ajudar a la seva optimització, al seu control més segur, i a fer processos ambientalment més nets.

Dra. Lourdes F. Vega

Universitat Autònoma de Barcelona

lvega@icmab.es

Referencias

Artículo: Olivet, A; Duque, D; Vega, LF, "Sulfur hexafluoride's liquid-vapor coexistence curve, interfacial properties, and diffusion coefficients as predicted by a simple rigid model", JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 123 (19): 94508-94508 NOV 15 2005.

[View low-bandwidth version](#)