

SIMULACIÓN DE LA CINÉTICA DE LA POLIMERIZACIÓN POR RADICALES LIBRES EN EMULSIÓN CON LA AYUDA DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES

Porfirio López-Domínguez¹, Iván Zapata González², Enrique Saldívar Guerra², María Esther Treviño-Martínez³

¹Centro de Investigación en Química Aplicada, Procesos de Polimerización, Mexico. ²Centro de Investigación en Química Aplicada, Procesos de polimerización, Mexico. ³Centro de Investigación en Química Aplicada, Química Macromolecular y Nanomateriales, Mexico.

La polimerización por radicales libres en emulsión (PE) es una técnica eficiente para la producción de látex o materiales poliméricos con muy altas masas molares con aplicaciones en recubrimientos, medicina, electrónica y fibras textiles. La PE ocurre principalmente en partículas poliméricas dispersas en agua. Con respecto al tamaño de las partículas poliméricas, cuyos diámetros pueden variar de 10 a 500 nm, la distribución de tamaños de partícula (DTP) contiene información sobre el número o volumen de partículas y sus tamaños. Conocer la forma y promedio de la DTP es importante porque afecta directamente a las propiedades del látex como la viscosidad, adhesión y tiempo de secado (Vale & McKenna, 2005) cuando el látex se usa como producto (e.g. en pinturas). Algunas técnicas experimentales para estimar la DTP incluyen dispersión dinámica de luz, microscopio electrónico de transmisión y difracción láser (Microtrac Company, 2024; Vale & McKenna, 2005). La estimación de la forma de la DTP se ha realizado usando modelos matemáticos que resultan en ecuaciones diferenciales parciales. Una manera de acelerar la simulación de la cinética es a través del uso de herramientas de la inteligencia artificial como las redes neuronales artificiales. En este trabajo se propone una red artificial para estimar la conversión y diámetro de partículas en una PE de monómeros vinílicos.

Vale, H. M., & McKenna, T. F. (2005). Modeling particle size distribution in emulsion polymerization reactors. *Progress in Polymer Science*, 30(10), 1019-1048. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2005.06.006>

Microtrac Company (2024). Analysis of particle size distribution. Retrieved May 2024 from <https://www.microtrac.com/knowledge/particle-size-distribution/#:~:text=A%20particle%20size%20distribution%20indicates,called%20size%20classes%20or%20fractions.&text=Quantification%20can%20now%20be%20performed,the%20total%20amount%20or%20weight>.

Keywords: emulsión, nanopartícula, inteligencia artificial

Acknowledgment:

Se agradece al centro de investigación en química aplicada (CIQA) y al consejo nacional de humanidades, ciencias y tecnologías (CONAHCYT) por su apoyo administrativo.

Presenting author's email: porfirio.lopez.ps@ciqa.edu.mx