

Informe descriptivo de la Patente de Invención para

"NANORREDES PARA LA ELIMINACIÓN DE CONTAMINANTES DE SOLUCIONES ACUOSAS, KITS PARA LAS MISMAS Y MÉTODOS DE SU USO"

Campo Técnico

[001] Esta invención se refiere al campo del secuestro y más particularmente al campo del secuestro de material de ambientes acuosos.

Antecedentes

[002] La descontaminación y eliminación de materiales de desecho orgánicos como lodos de aguas residuales, manejo de animales, desechos de procesamiento de alimentos, fluido de fracturación hidráulica, petróleo y gas y otras aguas residuales industriales presentan preocupaciones tanto ambientales como de salud pública. El manejo y la eliminación del agua contaminada tiene importantes implicaciones sociales, ambientales y económicas. Actualmente, los lodos residuales de aguas residuales se digieren, incineran, depositan en vertederos, se devuelven al mismo ambiente o se utilizan como fertilizante mediante la aplicación de biosólidos residuales en tierras agrícolas.

[003] Se ha demostrado la encapsulación de partículas inorgánicas con polímeros (E. Bourgeat-Lami and E. Duguet: Polymer encapsulation of inorganic particles; in

Functional coatings, S.K. Ghosh (ed.); 2006, Wiley-VCH, Weinheim; Capítulo 4, pp. 85-152). En aplicaciones biomédicas, el recubrimiento de nanopartículas inorgánicas con un polímero, o su encapsulación en una matriz polimérica o capa de detergente es importante para propiedades tales como solubilidad mejorada (R. Ladj et al. Polymer encapsulation of inorganic nanoparticles for biomedical applications; Internal J. Pharm. 2013 (458) 230-241). En los campos de la física y la ingeniería se estudian los fluidos magnéticos compuestos por nanopartículas magnéticas recubiertas con un polímero y/o tensioactivo para estabilizar la partícula en el líquido huésped. Se han publicado varios métodos sintéticos para la preparación de tales sistemas (por ejemplo, J. Sommertune et al. Polymer/Iron oxide nanoparticles composites - a straight forward and scalable synthesis approach; Int. J. Mol. Sci. 2015 (16) 19752-19768).

Compendio

[004] Esta invención se basa, al menos en parte, en la elucidación de que la formación de nanorred depende del diámetro medio del agregado de tensioactivo, y la longitud del polímero circundante es determinante del tamaño mínimo del diámetro del agregado de tensioactivo para la formación de nanorredes. Al contrario de los estudios de solubilización de bicapas lipídicas con

polímeros de estireno-ácido maleico, la asociación de un tensioactivo con un polímero no conduce exclusivamente a una disminución del tamaño del agregado de tensioactivo. Más bien, la combinación de un polímero y un agregado de tensioactivo puede dar como resultado una combinación asociada que es mayor o menor que un agregado de tensioactivo solo en una solución. En el último caso, el polímero puede provocar la disociación de agregados tensioactivos relativamente grandes en la combinación asociada más pequeña de agregado de tensioactivo y polímero. Además, la utilización de una longitud de polímero más larga para la formación de nanorred puede dar como resultado una floculación acelerada o retardada, lo que puede ser beneficioso para la eliminación de nanorredes precipitados mediante separación física o contacto mejorado en un fluido tratado. En consecuencia, una nanorred compuesta por un polímero de diferente peso molecular puede tener ventajas cuando se aplica a varios procesos de tratamiento de aguas residuales.

[005] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit para secuestrar restos que no son agua de una solución acuosa, comprendiendo el kit: a) un agregado de tensioactivo que tiene un diámetro promedio de agregado; y b) un polímero que tiene un diámetro medio de partícula cuyo diámetro medio de partícula es igual o menor

que el diámetro medio del agregado; y c) un agente de precipitación, siempre que cuando el tensioactivo se seleccione del grupo que consiste en: Triton X-100™, Triton X-305™, N-dodecil-beta-D-maltósido (DDM), oleato de sodio, colato de sodio, desoxicolato de sodio (DOC), beta-octil glucósido (Beta-OG), n-óxido de lauril dimetilamina (LDAO), entonces no se selecciona del grupo de polímeros que consiste en: SMA-2000™ SMA-2021™, y Di-ácido isobutileno-co-maleico (DIBMA).

[006] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en este documento en el que el agente de precipitación se selecciona del grupo que consiste en: un generador de cationes, un catión, un ácido, un catión divalente, un catión trivalente y mezclas de los mismos.

[007] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito aquí en el que el agente de precipitación se selecciona del grupo que consiste en: ácido acético, ácido málico, ácido cítrico, ácido tartárico, ácido fumárico, ácido láctico, ácido clorhídrico, ácido sulfúrico y ácido fosfórico.

[008] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el tensioactivo se selecciona del grupo que consiste en: tensioactivos aniónicos, tensioactivos no iónicos,

tensioactivos derivados de azúcar, tensioactivos derivados de glicidilo, tensioactivos derivados de alcoholes de ácidos grasos, tensioactivos no iónicos, sacárido polietilenoóxido tensioactivos combinados, tensioactivos de éster de sacáridos, tensioactivos basados en azúcares sulfonados, tensioactivos basados en aldonamida, tensioactivos basados en amida azúcar, tensioactivos aminoalcohol, tensioactivos basados en aminoácidos, tensioactivos poliol, tensioactivos de 1,2 glicol y tensioactivos zwitteriónicos.

[009] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el que el tensioactivo es un tensioactivo no iónico.

[0010] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el que el tensioactivo es un tensioactivo iónico.

[0011] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el que el tensioactivo es un tensioactivo aniónico.

[0012] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el tensioactivo tiene una carga neutra.

[0013] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el que el tensioactivo es un tensioactivo no cargado.

[0014] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es soluble en agua.

[0015] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es insoluble en agua.

[0016] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el que el polímero es un polímero largo.

[0017] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero tiene un peso molecular de al menos 1.500 Da.

[0018] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero tiene un peso molecular de al menos 26.000 Da.

[0019] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero tiene un peso molecular de al menos 100.000 Da.

[0020] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero tiene un peso molecular de al menos 125.000 0 Da.

[0021] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el que el polímero es un polímero anfipático.

[0022] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una cadena alquilo que tiene al menos 8 átomos de carbono de longitud.

[0023] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero es un copolímero de bloque.

[0024] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 1:1 a aproximadamente 4:1.

[0025] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 1:1 a aproximadamente 3:1.

[0026] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 2:1 a aproximadamente 3:1.

[0027] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 2:1.

[0028] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 3:1.

[0029] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el tensioactivo se selecciona del grupo que consiste en: etoxilatos de octilfenol, etoxilatos de nonilfenol, PGL1, PGL2, PGL3, PGL4, PGL5, Triton X-45™, Triton X-100™, Triton X-305™, oleato de sodio, LDAO y mezclas de los mismos.

[0030] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es una mezcla de PGL5 y oleato de sodio.

[0031] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es una mezcla de PGL5 y oleato de potasio.

[0032] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el

que el polímero se selecciona del grupo que consiste en: SMA-725™, SMA-2000™, SMA-3000™, SMA-2021™, polimetacrilato, DIBMA, estireno copolímeros de bloque de carbamato y copolímeros de bloque de estireno maleimida.

[0033] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el que el polímero es SMA-725™.

[0034] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un kit descrito en el presente documento en el que se hidroliza al menos una parte del polímero.

[0035] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred que comprende: a) un agregado de tensioactivo que tiene un diámetro promedio de agregado; y b) un polímero que tiene un diámetro de partícula promedio cuyo diámetro de partícula promedio es igual o menor que el diámetro promedio del agregado, siempre que cuando el tensioactivo se seleccione del grupo que consiste en: Triton X-100™, Triton X-305™, N-dodecil-beta-D-maltósido (DDM), oleato de sodio, colato de sodio, desoxicolato de sodio (DOC), beta-octilglucósido (Beta-OG), n-óxido de lauril dimetilamina (LDAO), entonces el polímero no está seleccionado del grupo que consiste en: SMA-2000™, SMA-2021™ y ácido di-isobutileno-co-maleico (DIBMA).

[0036] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento

en la que la nanorred tiene un diámetro mayor que el diámetro medio de las partículas de polímero.

[0037] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo se selecciona del grupo que consiste en: tensioactivos aniónicos, tensioactivos no iónicos, tensioactivos derivados de azúcares, tensioactivos derivados de glicidilo, tensioactivos derivados de alcoholes de ácidos grasos, tensioactivos no iónicos, tensioactivos de combinación de sacárido polietilenóxido, tensioactivos de éster sacárido, tensioactivos a base de azúcar sulfonado, tensioactivos a base de aldonamida, tensioactivos a base de amida azúcar, tensioactivos de amino alcohol, tensioactivos a base de aminoácidos, tensioactivos de poliol, tensioactivos de 1,2 glicol y tensioactivos zwitteriónicos.

[0038] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo es un tensioactivo no iónico.

[0039] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo es un tensioactivo iónico.

[0040] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo es un tensioactivo aniónico.

[0041] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo tiene una carga neutra.

[0042] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo es un tensioactivo no cargado.

[0043] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo es soluble en agua.

[0044] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo es insoluble en agua.

[0045] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero es un polímero largo.

[0046] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero tiene un peso molecular de al menos 1.500 Da.

[0047] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero tiene un peso molecular de al menos 26.000 Da.

[0048] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento

en la que el polímero tiene un peso molecular de al menos 100.000 Da.

[0049] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero tiene un peso molecular de al menos 125.000 Da.

[0050] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero es un polímero anfipático.

[0051] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero comprende una cadena alquilo que tiene al menos 8 átomos de carbono de longitud.

[0052] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero es un copolímero de bloques.

[0053] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 1:1 a aproximadamente 4:1.

[0054] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 1:1 a

aproximadamente 3:1.

[0055] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 2:1 a aproximadamente 3:1.

[0056] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 2:1.

[0057] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 3:1.

[0058] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo se selecciona del grupo que consiste en: etoxilatos de octilfenol, etoxilatos de nonilfenol, PGL1, PGL2, PGL3, PGL4, PGL5, Triton X-45™, Triton X-100™, Triton X-305™, oleato de sodio, LDAO y mezclas de los mismos.

[0059] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo es una mezcla de PGL5 y oleato de sodio.

[0060] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el tensioactivo es una mezcla de PGL5 y oleato de potasio.

[0061] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero se selecciona del grupo que consiste en: SMA-725™, SMA-2000™, SMA-3000™, SMA-2021™, polimetacrilato, DIBMA, estireno copolímeros de bloque de carbamato y copolímeros de bloque de estireno maleimida.

[0062] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el polímero es SMA-725™.

[0063] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que al menos una parte del polímero se hidroliza.

[0064] En realizaciones ilustrativas, hay una nanorred descrita en el presente documento que comprende además un resto no acuoso secuestrado.

[0065] En realizaciones ilustrativas, se proporciona una nanorred descrita en el presente documento en la que el resto no acuoso secuestrado es un resto de hierro.

[0066] En realizaciones ilustrativas, existe un método para secuestrar un resto que no es agua de una

solución acuosa, comprendiendo el método: a) añadir un tensioactivo que tiene un diámetro medio de agregado a la solución acuosa que comprende el resto que no es agua; y b) añadir un polímero que tiene un diámetro medio de partícula cuyo diámetro medio de partícula es igual o menor que el diámetro medio del agregado a la solución acuosa que comprende el resto no agua, proporcionando así una solución acuosa tratada, que cuando el tensioactivo se selecciona de el grupo formado por: Triton X-100™, Triton X-305™, N-dodecil-beta-D-maltósido (DDM), oleato de sodio, colato de sodio, desoxicolato de sodio (DOC), beta-octil glucósido (Beta-OG), n-óxido de lauril dimetilamina (LDAO), entonces el polímero no se selecciona del grupo que consiste en: SMA-2000™ SMA-2021™ y ácido di-isobutileno-co-maleico (DIBMA).

[0067] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento añadiendo además un agente de precipitación a la solución acuosa tratada.

[0068] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento que comprende además mezclar.

[0069] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento que incluye además la eliminación de partículas sólidas de la

solución tratada.

[0070] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que la eliminación de partículas sólidas comprende al menos una seleccionada del grupo que consiste en: filtración, centrifugación, separación por gravedad, flotación, desnatado y atracción electromagnética.

[0071] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el tensioactivo se selecciona del grupo que consiste en: tensioactivos aniónicos, tensioactivos no iónicos, tensioactivos derivados de azúcares, tensioactivos derivados de glicidilo, tensioactivos derivados de alcoholes de ácidos grasos, tensioactivos no iónicos, tensioactivo de combinación de sacárido polietilenóxido, tensioactivos de éster sacárido, tensioactivos basados en azúcares sulfonados, tensioactivos basados en aldonamida, tensioactivos basados en azúcar amida, tensioactivos aminoalcohol, tensioactivos basados en aminoácidos, tensioactivos poliol, tensioactivos de 1,2 glicol y tensioactivos zwitteriónicos.

[0072] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es un tensioactivo no iónico.

[0073] En realizaciones ilustrativas, se

proporciona un método descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es un tensioactivo aniónico.

[0074] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el tensioactivo tiene una carga neutra.

[0075] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es un tensioactivo no cargado.

[0076] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es soluble en agua.

[0077] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es insoluble en agua.

[0078] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero es un polímero largo.

[0079] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero tiene un peso molecular de al menos 1.500 Da.

[0080] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero tiene un peso molecular de al menos 26.000 Da

[0081] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero tiene un peso molecular de al menos 100.000 Da.

[0082] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero tiene un peso molecular de al menos 125.000 Da.

[0083] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero es un polímero anfipático.

[0084] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una cadena alquilo que tiene al menos 8 átomos de carbono.

[0085] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero es un copolímero de bloques.

[0086] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 1:1 a aproximadamente 4:1.

[0087] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en

el que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 1:1 a aproximadamente 3:1.

[0088] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 3:1.

[0089] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 2:1.

[0090] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero comprende una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 3:1.

[0091] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el tensioactivo se selecciona del grupo que consiste en: etoxilatos de octilfenol, etoxilatos de nonilfenol, PGL1, PGL2, PGL3, PGL4, PGL5, Triton X-45™, Triton X-100™, Triton X-305™, oleato de sodio, LDAO y mezclas de los mismos.

[0092] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es una mezcla de PGL5 y oleato de

sodio.

[0093] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el tensioactivo es una mezcla de PGL5 y oleato de potasio.

[0094] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero se selecciona del grupo que consiste en: SMA-725™, SMA-2000™, SMA-3000™, SMA-2021™, polimetacrilato, DIBMA, estireno copolímeros de bloque de carbamato y copolímeros de bloque de estireno maleimida.

[0095] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que el polímero es SMA-725™.

[0096] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que se hidroliza al menos una parte del polímero.

[0097] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método para secuestrar un resto que no es agua de una solución acuosa, comprendiendo el método añadir una nanorred descrita en el presente documento a la solución acuosa que comprende un resto que no es agua, formando así una solución acuosa tratada.

[0098] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento que

comprende además la adición de un agente de precipitación a la solución acuosa tratada.

[0099] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento que comprende además mezclar.

[00100] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en este documento que comprende además la eliminación de partículas sólidas de la solución acuosa tratada.

[00101] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método descrito en el presente documento en el que la eliminación de partículas sólidas comprende al menos una seleccionada del grupo que consiste en: filtración, centrifugación, separación por gravedad, flotación, desnatado y atracción electromagnética.

[00102] Otros aspectos y características de la presente invención resultarán evidentes para los expertos en la técnica tras la revisión de la siguiente descripción de realizaciones específicas de la invención junto con las figuras adjuntas.

Breve descripción de los dibujos

[00103] En los dibujos que ilustran aspectos de la invención,

[00104] Figura 1: Relación estructura-función entre la longitud del polímero y el diámetro del agregado de

tensioactivo en la formación de nanorred. A) Formación de nanorred cuando la longitud del polímero y el tamaño del agregado de tensioactivo coinciden bien. B) La formación de nanorred no ocurre cuando el diámetro del agregado de tensioactivo es menor que el diámetro de las partículas de polímero compacto. C) Formación de nanorred cuando un gran diámetro de agregado de tensioactivo se descompone en múltiples nanorredes más pequeñas. D) Formación de nanorred cuando un gran agregado de tensioactivo es estabilizado por múltiples polímeros, lo que lleva a un aumento general del tamaño de partícula.

[00105] Figura 2: C Coprecipitación de polímero complejado y tensioactivo debido a la adición de ácido. A) Absorbancia de nanorredes precipitadas con ácido formadas a partir de proporciones variables de tensioactivo Triton X-305™. La absorbancia se midió a 540 nm como un sustituto de la luz dispersada por flóculos. Se formaron nanorredes con polímero de cadena larga (SMA-725™, triángulos), polímero de cadena corta (SMA-2000™, cuadrados), y se compararon con un control de solo tensioactivo (control, círculos). B) Como en A, con Triton X-100™ como tensioactivo. C) Como en A, con Triton X-45™ como tensioactivo.

[00106] Figura 3: SMA-725™ mejora la velocidad de floculación de las nanorredes. A) Esquema del ensayo de distribución. Las nanorredes precipitadas floculan y flotan

con el tiempo, la masa total de flóculos se consolida al volumen indicado del tubo (superior, medio superior, medio inferior e inferior: 100-75%, 75-50%, 50-25% y 0-25%, respectivamente) B) Distribución del oleato de sodio precipitado a lo largo del tiempo. C) Distribución de oleato de sodio precipitado/nanorred SMA-725™ a lo largo del tiempo. D) Distribución de oleato de sodio precipitado/nanorredes SMA-2000™ a lo largo del tiempo. E) Solución de limpieza de oleato de sodio precipitado (triángulos apuntando a la parte superior de la página), oleato de sodio y SMA-725™ agregados secuencialmente (triángulos apuntando a la parte inferior de la página), oleato de sodio/nanorredes SMA-725™ (círculos) y nanorredes (cuadrados) de oleato de sodio SMA-2000™. El aclaramiento de la solución se midió mediante absorbancia a 540 nm.

[00107] Figura 4: Eliminación de hierro disuelto para nanorredes en concentraciones variables de cationes divalentes. Las nanorredes SMA-2000™ formadas con el tensioactivo indicado en una proporción de 5:1 (tensioactivo:polímero) se incubaron con soluciones de hierro durante la noche, luego se filtraron y se cuantificó el contenido de hierro. Como control, las soluciones de hierro se filtraron después de cambiar el pH de la solución o sin tratamiento.

[00108] Figura 5: Eliminación de hierro disuelto

para nanorredes en concentraciones variables de cationes divalentes. Las nanorredes SMA-2000™ formadas con el tensioactivo indicado en una proporción de 5:1 (tensioactivo:polímero) se incubaron con soluciones de hierro durante 10 minutos, luego se filtraron y se cuantificó el contenido de hierro. Como control, las soluciones de hierro se filtraron después de cambiar el pH de la solución o sin tratamiento.

[00109] Figura 6: Eficiencias de eliminación de hierro con nanorredes SMA-2000™ y SMA-725™ en concentraciones de tampón variables.

[00110] Figura 7: Eliminación de hierro de soluciones de hierro de 100 ppm (75:25 Fe^3 +: Fe^2 +) en nanorredes SMA-725™.

[00111] Figura 8: Gráfico que muestra el efecto de la relación polímero y tensioactivo: polímero sobre la eliminación de hierro en nanorredes de oleato de sodio.

[00112] Figura 9: Efecto del tratamiento de varias nanorredes en muestras de agua producida (500 ppm de aceite, > 100.000 TDS, > 1.000 ppm de cationes divalentes).

[00113] Figura 10: Cuantificación posterior a la filtración del agua producida tratada. El petróleo y el gas (O y G), los sólidos suspendidos totales (TSS) y el hierro total se cuantificaron después de la filtración de las muestras en la Figura 9.

[00114] Figura 11: Eliminación de contaminantes del agua producida con nanorredes OPGW (SMA-725™, oleato de sodio al 75%, monoestearato de poligliceril-10 al 25%, relación en peso de polímero: tensioactivo 1:1; tiempo de residencia de 10 min, después de la filtración). A) Eliminación de hierro B) Eliminación de color y C) Eliminación de turbidez.

[00115] Figura 12: Eliminación de contaminantes del agua producida con nanorred OPGW después de la flotación por aire disuelto, seguida de filtración. A) Concentración total de hierro antes y después del tratamiento. La concentración de hierro total se determinó mediante el método Ferrozine. B) Tratamiento previo y posterior de la acuarela. Se midió el color amarillo indicativo de hidrocarburos disueltos y hierro coloidal mediante absorbancia a 350 nm. C) Pretratamiento y postratamiento de turbidez. La turbidez se midió mediante absorbancia a 540 nm.

[00116] Figura 13: A) Eliminación de hidrocarburos de petróleo extraíbles con una longitud de cadena de 10-32 carbonos donde "Inicio" es antes del tratamiento, "Filtrado" es el tratamiento sin nanorredes y filtración, y "Filtrado+Nanorredes" es el tratamiento con nanorredes y filtración. B) Eliminación de Zn y Fe del agua producida. C) Eliminación de varios metales del agua producida.

[00117] Figure 14: Ilustración de unidades monoméricas de un polímero en formas hidratadas y no hidratada.

[00118] Figure 15: Formación de nanorred con tensioactivos modelo a) Triton X-100™ y b) Triton X-45™ y copolímeros de bloque de ácido estireno maleico.

[00119] Figure 16: Evolución del método de puntuación cuantitativa para la formación de nanorred.

[00120] Figure 17: Puntuación de nanorred para cada combinación de polímero SMA.

[00121] Figure 18: Puntuaciones de nanorred para sulfonatos, lactilatos y tridecetil sulfonato con diferentes copolímeros de bloques.

[00122] Figure 19: Puntuaciones de formación de nanorred con polímeros SMA con DIBMA.

[00123] Figure 20: Puntuaciones de nanorred con diferentes copolímeros de bloque sobre diferentes valores de HLB.

[00124] Figure 21: Efecto de la cadena alquilo y la longitud del grupo de cabeza hidrófilo sobre la formación de nanorred con grupos de cabeza de tensioactivo variables. Efecto de la longitud de la cadena alquilo en las puntuaciones de nanorred para tensioactivos con A) grupos de cabeza de aminoácidos (N-dodecanoil metionina, N-dodecanoil treonina, N-decanoil metionina, N-decanoil

treonina, N-octanoil metionina y N-octanoil treonina en orden de arriba a abajo), B) Grupos de cabeza de sulfonato de sodio (Na-dodecilbencenosulfonato, Na-dodecano sulfonato, 1-octano sulfonato, p-tolueno-1-sulfonato y Na-pentanosulfonatos en orden de arriba a abajo), C) grupos de cabeza de éter de etilenglicol (éter monododeclico de hexaetilenglicol, éter monododecílico de heptaetilenglicol, éter monodecílico de hexaetilenglicol y monoctoilo de hexaetilenglicol en orden de arriba a abajo), D) T Tioglucósidos (n-dodecil- β -D-tioglucopiranosido, n-dodecil- β -D-tiomaltopiranosido, n-decil- β -D-tioglucopiranosido, n-decil- β -D-tiomaltopiranosido, n-nonil- β -D-tioglucopiranosido, n-octil-maltósido, fluorado, n-octil- β -D-tiomaltopiranosido y n-heptil- β -D-tioglucopiranosido, en orden de arriba hacia abajo). Efecto del tamaño del grupo de cabezas hidrófilas (representado por HLB) en las puntuaciones de nanorred para tensioactivos con E) grupos de cabezas de sorbitán polietoxilado (SPAN 20™, TWEEN 65™, TWEEN 85™, TWEEN™ 80, TWEEN60™, TWEEN 40™ y TWEEN 20™ en orden de arriba hacia abajo). F) Grupos de cabeza de fenil polietilenglicol (TRITON X-45™, TRITON X-100™, y TRITON X-305™).

[00125] Figura 22: Biblioteca de nanorred con tensioactivos aniónicos empleados para cribar la eliminación de iones metálicos Cu^{2+} del agua de mar.

[00126] Figura 23: Biblioteca de nanorred con tensioactivos no iónicos utilizada para cribar la eliminación de iones metálicos Cu^{2+} del agua de mar.

[00127] Figura 24: Biblioteca de nanorred con tensioactivos aniónicos utilizados para filtrar la eliminación de iones metálicos Zn^{2+} del agua de mar.

[00128] Figura 25. Biblioteca de nanorred con tensioactivos no iónicos aplicados para filtrar la eliminación de iones metálicos Zn^{2+} del agua de mar.

[00129] Figura 26: Ejemplo de curva de sedimentación por lotes de una mezcla de SMA-725™ y BIOSOFT D-40 añadida a una solución de calcio. La sedimentación de flóculos se cuantifica a lo largo del tiempo y se utiliza una función sigmoidea para ajustar los datos.

[00130] Figure 27: Gráfico de barras que cuantifica la velocidad de sedimentación aparente (t_{50}) para tres polímeros diferentes. Las barras de error se muestran en negro.

[00131] Figure 28: Parámetros de agua seleccionados de muestras de agua producidas tratadas y no tratadas. A) Niveles de hierro antes y después del tratamiento. B) Niveles de turbidez pre y postratamiento. C) Potencial oxidativo reductor pre y postratamiento. D) Sólidos totales disueltos antes y después del tratamiento. E) Niveles de bicarbonato antes y después del tratamiento.

[00132] Figure 29: Gráficos de barras que ilustran (A) la eliminación de hierro del agua producida usando varias concentraciones de nanorredes y (B) ClO_2 residual.

Descripción detallada

[00133] Las nanorredes descritas en el presente documento proporcionan una eliminación eficaz de un contaminante objetivo seleccionando una longitud de polímero adecuada y una cantidad de polímero basada en el tensioactivo que es más adecuado para la eliminación del contaminante objetivo. Prácticamente cualquier agregado de tensioactivo puede usarse en una nanorred siempre que se seleccione un polímero adecuado. La neutralización del polímero proporciona la precipitación de las nanorredes y los contaminantes secuestrados asociados. Esto es ventajoso ya que un precipitado sólido compuesto por nanorredes y contaminantes secuestrados asociados puede eliminarse fácilmente mediante métodos físicos de separación. Ejemplos no limitantes de métodos de separación física incluyen flotación por aire disuelto (DAF), sedimentación, filtración, centrifugación, separación por gravedad, flotación, desnatado, atracción o repulsión electromagnética, microfiltración y nanofiltración. La relación entre el tamaño del polímero y la estructura del agregado de tensioactivo permite diseñar formulaciones de nanorred que se dirigen a contaminantes seleccionados que

encajan en sistemas de separación física comunes.

[00134] Los tensioactivos son típicamente moléculas anfipáticas con un grupo de cabeza hidrófilo y un grupo funcional lipófilo/hidrófobo. Dependiendo del tamaño y la carga de los grupos de cabeza hidrófobos a hidrófilos, los tensioactivos pueden ser solubles o insolubles en agua. Este equilibrio se denomina típicamente equilibrio hidrófilo lipófilo (HLB) (Griffin, William C. (1949), "Classification of Surface-Active Agents by 'HLB'", Journal of the Society of Cosmetic Chemists, 1 (5): 311-26), ya que el grupo de cabeza típicamente tiene afinidad por el agua y Los tensioactivos pueden ser insolubles en agua, donde normalmente se utilizan para preparar emulsiones de agua en aceite y tienen un valor de HLB <10 , o solubles en agua, donde normalmente se utilizan para preparar emulsiones de aceite en agua y tienen un valor de HLB > 10 . Los tensioactivos solubles forman típicamente monocapas de Gibbs en soluciones acuosas, donde el tensioactivo libre es capaz de intercambiarse de la fase acuosa a granel a la interfase aire-agua. Por el contrario, los tensioactivos insolubles forman monocapas de Langmuir que son comprimibles y no se intercambian, o solo con moderación, con la fase acuosa a granel (Rogalska, E., et al., (2000). Formation and properties of Langmuir and Gibbs monolayers: a comparative study using hydrogenated and partially

fluorinated amphiphilic derivatives of mannitol. *Chemistry and Physics of Lipids*, 105(1), 71-91. doi:10.1016/s0009-3084(99)00130-, 9). Los ejemplos de lípidos incluyen fosfatidilcolina, fosfatidiletanolamina, fosfatidilglicerol y lecitinas. Los ejemplos de tensioactivos solubles incluyen Triton X-100™, dodecilsulfato de sodio y poliglicerol-10-laurato, todos los cuales tienen un HLB> 10. Los ejemplos de tensioactivos insolubles incluyen SPAN 80™ o TWEEN 85™.

[00135] Como se usa en el presente documento, el término "nanorred" se refiere a una partícula formada por una asociación entre un polímero y un agregado de tensioactivo. La nanorred se autoensambla en un entorno acuoso, es estable en solución acuosa y se compone de i) un polímero y ii) un agregado de tensioactivo. Las nanorredes permanecen asociadas a concentraciones más bajas en relación con los agregados de tensioactivo en ausencia del polímero. La estabilidad de la solución de las nanorredes puede verse alterada por la adición de un material de desestabilización adecuado. Por ejemplo, y sin limitación, la neutralización de grupos de ácido carboxílico cargados por un ácido puede causar la desestabilización de una nanorred que comprende un componente de ácido maleico en el polímero. Sin estar limitado por la teoría, se cree que las nanorredes son el resultado de interacciones entre las

cadenas alquilo de los tensioactivos y las cadenas alquilo de las porciones hidrofóbicas del polímero. A menudo, las nanorredes son partículas coloidales que comprenden copolímeros de bloques anfipáticos y superficies ctants. Los copolímeros de bloques anfipáticos a menudo comprenden un grupo funcional hidrófilo y un grupo funcional hidrófobo. Los ejemplos del grupo funcional hidrófilo incluyen, pero no se limitan a, un ácido maleico, un ácido carboxílico y un grupo etanol unido por amida. Los ejemplos del grupo funcional hidrófobo incluyen, pero no se limitan a, un estireno, di-isobutilo.

[00136] Como se usa en el presente documento, "diámetro de nanorred" se refiere al tamaño de una nanorred en un entorno acuoso medido por dispersión dinámica de luz. Un "diámetro medio de nanorred" se refiere al promedio del tamaño de una pluralidad de nanorredes en un entorno acuoso medido por dispersión dinámica de luz. El término "diámetro medio de nanorred" puede usarse indistintamente en el presente documento con el término "diámetro de nanorred" o "tamaño de nanorred". En la sección de Ejemplos del presente documento se proporcionan ejemplos, sin limitación, de cómo medir un diámetro medio de nanorred.

[00137] Como se usa en el presente documento, el término "solución acuosa" se refiere a un entorno líquido en el que el agua es un componente principal. Ejemplos de

soluciones acuosas incluyen, pero no se limitan a, aguas residuales, material acuoso recuperado de un proceso (como lodos de depuradora, estiércol animal, desechos de procesamiento de alimentos), aguas residuales de petróleo y gas, fluido de fracking usado, efluente industrial, agua subterránea y similares.

[00138] Como se usa en el presente documento, el término "agente de precipitación" se refiere a cualquier sustancia que sea catiónica y/o genere un catión tras la exposición a un entorno acuoso. Una sustancia que es catiónica es un catión y una sustancia que genera un catión tras la exposición a un entorno acuoso se denomina en el presente documento "generador de cationes". Los ejemplos, sin limitación, de agentes de precipitación incluyen un ácido, un catión divalente, un catión trivalente, ácido acético, ácido málico, ácido cítrico, ácido tartárico, ácido fumárico, ácido láctico, ácido clorhídrico, ácido sulfúrico, ácido fosfórico y mezclas de los mismos.

[00139] Como se usa en el presente documento, el término "tensioactivo" se refiere a cualquier agente tensioactivo que contenga una porción polar que termodinámicamente prefiere solvatarse con un disolvente polar, y una porción no polar que termodinámicamente prefiere solvatarse con un disolvente no polar. El término "tensioactivo" también pretende abarcar tensioactivos

aniónicos, catiónicos, no iónicos y zwitteriónicos. Los tensioactivos adecuados para su uso en la presente invención forman agregados en solución acuosa. Los tensioactivos que no forman agregados no están incluidos en el término "tensioactivo" como se usa en este documento.

[00140] Un "tensioactivo zwitteriónico" es un tensioactivo con una porción polar que se ioniza para formar un anión en solución acuosa (el anión que reside en la porción polar conectada a la porción no polar). Un "tensioactivo catiónico" se refiere a un tensioactivo que tiene una porción polar catiónica que se ioniza para formar un catión en solución acuosa (el catión que reside en la porción polar conectada a la porción no polar). Un tensioactivo "no iónico" se refiere a un tensioactivo que tiene una porción polar que no se ioniza en solución acuosa. Un "tensioactivo zwitteriónico" se refiere a un tensioactivo que tiene sitios catiónicos y aniónicos separados y no está cargado (por ejemplo, ejemplos no limitantes de zwitteriones incluyen acetato de dialquilamonio como la forma de zwitterión del ácido acético de N, N-dialquilaminio o acetato de dialquilsulfonio de betaína), (de las páginas 224-25, The Vocabulary of Organic Chemistry, Milton Orchin et al., Eds., John Wiley & Sons, 1980). Un jabón es una sal de un tensioactivo aniónico, típicamente un ácido graso.

[00141] Una persona experta en la técnica familiarizada con los tensioactivos apreciará la amplia gama de tensioactivos adecuados para su uso en la presente invención, véanse por ejemplo y sin limitación las siguientes referencias: Drew Myers, *Surfactant Science and Technology*, VCH Publishers, Inc. 1988.; Bordes, Romain, and Krister Holmberg. 2015. "Amino Acid-Based Surfactants - Do They Deserve More Attention?" *Advances in Colloid and Interface Science* 222 (August): 79-91.; *Essentials of Glycobiology*. 3rd edition Varki A, Cummings RD, Esko JD, et al., editors. Cold Spring Harbor (NY): Cold Spring Harbor Laboratory Press; 2015- 2017; Reference for definition: Zhang, X., Song, F., Taxipalati, M., Wei, W., & Feng, F. (2014). Comparative Study of Surface-Active Properties and Antimicrobial Activities of Disaccharide Monoesters. *PLoS ONE*, 9(12), e114845. doi:10.1371/journal.pone.0114845; R. H. Beck, N. J. Kalff, and H. W. W. Roper, European Patent Application, EP 536939, 1993; V. Au, B. Harichian, A. Hung, and R. Vermeer, US 5872111 A, 1999; J. J. Scheibel, D. S. Connor, R. E. Shumate, and L. J. Charles, PCT Int Appl. WO 92 06984, 1992; C. L. Mehlretter, R. L. Mellies, and J. C. Rankin, US patent 2670345, 1954; Z. Wang. United States patent US 7655611 B2, 2010; and Sari-Chmayssem N., Pessel F., Guegan J. P., S. Taha, Mawlawi H., and Benvegna T. Direct and one-pot conversion of polyguluronates and

alginates into alkyl-L-guluronamide-based surfactant compositions, Green Chemistry; Novel surfactants and novel emulsifiers made from disaccharides. WO 2006/100091; US 6,184,196 B1. SUCROSE BASED SURFACTANTS AND METHODS THEREOF; WO 94/12511; and Safety Assessment of Alkyl Sultaines as Used in Cosmetics. Christine Burnett. Cosmetic Ingredient Review, June 30, 2017.

[00142] La formación de nanorred comienza con tensioactivos operables para formar un agregado que tiene un diámetro de agregado promedio que excede un tamaño de partícula promedio umbral que puede determinarse basándose en el tamaño de partícula promedio del polímero para uso en la composición de nanorred. Los tensioactivos que se exponen a continuación se pueden usar en realizaciones de nanorredes descritas en el presente documento. En algunos casos, los tensioactivos pueden describirse según su grupo polar y su grupo no polar. Los enlaces comunes entre un componente polar y un componente no polar de un tensioactivo incluyen, pero no se limitan a, enlazadores de éter, amina, éster, fosfato, tioéster y amida.

Tensioactivos aniónicos

[00143] Los grupos polares sulfonato pueden unirse a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R-(SO_3M)_z$.

[00144] Los grupos polares de sulfato se pueden unir

a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R-(OSO_3M)_z$.

[00145] Los grupos carboxilato polares se pueden unir a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R-(COOM)_z$.

[00146] Los grupos polares fosfato pueden unirse a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R-(OPO_3M)_z$.

[00147] Los grupos polares fosfonato pueden unirse a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R-(PO_3M)_z$.

[00148] Los grupos polares de ácido carboxílico alfa-sulfonado pueden unirse a un grupo apolar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R-(CH(SO_3M)COOM)_z$. R puede ser uno cualquiera o más de los ácidos láurico, palmítico y esteárico.

[00149] Los grupos polares de éster de ácido carboxílico alfa-sulfonado pueden unirse a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R-(CH(SO_3M)COOR^1)_z$. R puede ser uno cualquiera o más de los ácidos láurico, palmítico y esteárico. R^1 es alquilo C_1-C_5 lineal o ramificado. Z puede ser 1, 2, 3 o cualquier combinación de los mismos y el grupo que no es R puede residir en el mismo carbono en R o en carbonos diferentes.

[00150] Los grupos polares de éster sulfonato se

pueden unir a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R(COX(CH_2)_nSO_3M)_z$ (n puede estar en el rango de 2 y 8 y X es O, NH o $N-R^1$).

[00151] Los grupos polares de éster sulfonato de arilamida pueden unirse a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R(COXArSO_3M)_z$.

[00152] Los grupos polares de xantato pueden unirse a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R(OCS_2^-M)_z$.

[00153] En cualquiera de las fórmulas anteriores, M puede ser cualquier catión monovalente que incluye, por ejemplo, Na^+ , K^+ , Li^+ .

Tensioactivos no iónicos

[00154] Los grupos polares de polioxietileno pueden unirse a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R(X(CH_2CH_2O)N_{CH_2CH_2OH})_z$ (X es O, S o NH).

[00155] Los grupos polares de polioxipropileno se pueden unir a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $R(X(CH_2CH(CH_3)O)N_{CH_2CH(CH_3)OH})_z$ ((X es O, S o NH).

[00156] Los grupos polares bis-polioxietilen amina se pueden unir a un grupo no polar para producir un tensioactivo de fórmula general: $(RX((CH_2CH_2O)N_{CH_2CH_2OH})_2$ (X es N)

[00157] Los grupos polares bis-polioxipropilen amina

se pueden unir a un grupo apolar para producir un tensioactivo de fórmula general:



[00158] En las fórmulas químicas representadas anteriormente, R es una cadena lineal o ramificada, saturada, monoinsaturada o poliinsaturada, cíclica alifática o cíclica aromática o policíclica, y todas las posibles combinaciones de los mismos. En algunas realizaciones, el cíclico aromático o no aromático está alquilado. En algunas realizaciones, R puede comprender adicionalmente O, N, S y combinaciones de los mismos, y adicionalmente estar funcionalizado con uno cualquiera o más restos tales como ácido carboxílico, amida carboxílica, ácido tiocarboxílico y combinaciones de los mismos. Generalmente, R tiene desde 8 hasta 40 átomos de carbono. En algunas realizaciones, R tiene tan solo 7 o más átomos de carbono. En algunas realizaciones, R tiene de 7 a 40 átomos de carbono. En algunas realizaciones, R tiene de 8 a 40 átomos de carbono. En algunas realizaciones, R tiene de 7 a 20 átomos de carbono, o R tiene de 8 a 20 átomos de carbono, o R tiene de 7 a 20 átomos de carbono. En algunas realizaciones, R tiene de 7 a 18 átomos de carbono, o R tiene de 8 a 18 átomos de carbono, o R tiene de 9 a 18 átomos de carbono.

[00159] Cuando una fórmula química anterior incluye

el parámetro "n", a menos que se exprese algún otro valor de n junto a una fórmula química particular, n puede tener los siguientes valores: En algunas realizaciones, n puede estar en el rango de 4 y 20, o en el rango de 5 y 18, o en el rango de 6 y 17, o en el rango de 7 y 16, o en el rango de 8 y 15.

[00160] Para una fórmula química anterior que incluye el parámetro "z", z puede ser 1, 2, 3 o cualquier combinación de los mismos y el grupo no-R puede residir en el mismo carbono en R o en diferentes carbonos del grupo R.

[00161] Para una fórmula química anterior que incluye el parámetro "Ar" en la fórmula química, Ar puede ser benceno, p-tolueno o naftaleno.

[00162] En algunas realizaciones de un tensioactivo representado por las fórmulas químicas anteriores, R puede ser ácido cólico o un derivado del mismo. En algunas realizaciones, R puede ser uno cualquiera o más de los ácidos láurico, palmítico y esteárico. En algunas realizaciones, R puede incluir hasta cinco grupos funcionales de ácido acético pendientes. En otras realizaciones, R puede ser cocoilo. En algunas realizaciones, R puede derivar de un ácido graso o un éster de ácido graso.

[00163] Las realizaciones que emplean tensioactivos que tienen uno de los grupos polares no iónicos descritos

anteriormente emplean combinaciones de grupos alquilo que pueden optimizar el tamaño medio del agregado de tensioactivo en relación con el tamaño medio de partícula del polímero que se empleará en la composición de nanorred y considerando además la contribución de un hetero -átomo que contiene parte de las estructuras.

Tensioactivos no iónicos derivados de azúcar, glicidilo y alcohol de ácidos grasos

[00164] Los ejemplos no limitantes de tensioactivos de esta categoría incluyen: derivados de polietilenglicol de ácidos grasos, tales como derivados de PEG de aminas de ácidos grasos. Ejemplos de tensioactivos específicos bajo esta categoría incluyen, pero no se limitan a: cocamina PEG-2, cocamina PEG-3, cocamina PEG-4, cocamina PEG-5, cocamina PEG-8, cocamina PEG-10, cocamina PEG-12, cocamina PEG-15, cocamina PEG-20, amina de sebo hidrogenada PEG-2, amina de sebo hidrogenada PEG-5, amina de sebo hidrogenada PEG-8, amina de sebo hidrogenada PEG-10, amina de sebo hidrogenada PEG-15, sebo hidrogenado PEG-20 amina de sebo hidrogenada PEG-30, amina de sebo hidrogenada PEG-40, amina de sebo hidrogenada PEG-50, lauramina PEG-2, oleamina PEG-2, oleamina PEG-5, oleamina PEG-6, oleamina PEG-10, oleamina PEG-15, oleamina PEG-20, oleamina PEG-25, oleamina PEG-30, palmitamina PEG-12, rapeseamina PEG-2, soyamina PEG-2, soyamina PEG-5, soyamina PEG-8, soyamina

PEG-10 y soyamina PEG -15.

Grupos funcionales basados en azúcar

[00165] Azúcares ácidos: azúcares que han tenido uno o más grupos hidroxilo sustituidos con un ácido carboxílico. Los ejemplos no limitantes de azúcares ácidos incluyen: Ácido glucónico y ácido ascórbico.

[00166] Deoxi Azúcares: Azúcar que tiene un grupo hidroxilo sustituido por un hidrógeno. Ejemplos no limitantes de desoxi azúcares: Ramnosa, Fucosa y Desoxirribosa.

[00167] Monosacáridos C₅ (furanosas): sacáridos de la cadena principal de 5 carbonos, se ciclarán para formar un anillo de 5 carbonos. Los ejemplos no limitantes de monosacáridos C₅ incluyen: Fructosa, ribosa, xilosa, arabinosa y liosa.

[00168] Monosacáridos C₆ (Piranosas): sacáridos de cadena principal de 6 carbonos, se ciclarán para formar un anillo de 6 carbonos. Los ejemplos no limitantes de monosacáridos C₆ incluyen: glucosa, manosa, alosa, altrosa, tallosa, galactosa, glucopiranosas.

[00169] Aminoazúcares: una molécula de azúcar en la que un grupo hidroxilo se ha reemplazado por un grupo amina. Lo más probable es que el grupo funcional esté conectado mediante un enlace amida con el ácido graso, pero los expertos en la técnica también pueden conectar el

aminoazúcar a través de uno de los grupos hidroxilo. Los ejemplos no limitantes de aminoazúcares incluyen: galactosamina, glucosamina, ácidos siálicos, N-acetil-D-glucosamina, manosamina.

[00170] Aldonamida: una categoría de tensioactivos a base de azúcar. Un ejemplo no limitante de un tensioactivo basado en aldonamida incluye: coco D-gluconamida.

[00171] Disacáridos: Los disacáridos son azúcares o carbohidratos que se obtienen uniendo dos monosacáridos. Se puede formar un enlace glicosídico entre cualquier grupo hidroxilo de los monosacáridos, lo que da lugar a muchas combinaciones diferentes de enlaces y estereoquímica, produciendo disacáridos con propiedades únicas. Los expertos en la técnica pueden hacer reaccionar posteriormente estos disacáridos con un ácido graso libre para formar un éster de alquilo de disacárido. Los ejemplos no limitantes de disacáridos incluyen: sacarosa, maltosa, lactosa, celobiosa, manobiosa, trehalosa, lactulosa, furanosa, xilobiosa, melibiosa, soforosa y rafinosa. Polisacáridos: una cadena de más de 2 sacáridos, unidos entre sí por enlaces glicosídicos. Un ejemplo no limitante de un grupo de polisacáridos son los alquilpoliglucósidos (APG).

[00172] Alcoholes de azúcar: Azúcares en los que se ha convertido el aldehído terminal del azúcar en un

alcohol. Los ejemplos no limitantes de alcoholes de azúcar incluyen: lactitol, sorbitol, isomalt, xilitol, eritritol y manitol.

[00173] Alcoholes de azúcar deshidratados: alcoholes de azúcar que se han deshidratado para formar un anillo de lactona ciclada. Los ejemplos no limitantes de alcoholes de azúcar deshidratados incluyen: sorbitán, manitan, xilitan, anhidroeritritol, furanósido y furanosa.

Métodos de adición de cadenas alquilo y azúcares para hacer tensioactivos a base de azúcar:

Enlace glucosídico: los azúcares se pueden unir a las cadenas alquilo a través de un enlace glucosídico. El enlace glicosídico puede estar unido por N, O S, por lo que un grupo hidroxilo del azúcar se reemplaza y se une a otra cadena carbonada mediante una amina, éter o tioéter. Todos los grupos funcionales de azúcar mencionados anteriormente se pueden usar para formar un enlace glicosídico con una cadena alquilo. Ejemplos no limitantes de tensioactivos derivados del azúcar incluyen: cocoil glucósido (ligado a O), octilglucamina (ligado a N), alquilpoliglucósidos, 3-(butiloxi)-2-hidroxipropil-beta-D-galactopiranosido, 3-(pentiloxi)-2-hidroxipropil-beta-D-galactopiranosido, 3-(hexiloxi)-2-hidroxipropil-beta-D-galactopiranosido, 3-(heptiloxi)-2-hidroxipropil-beta-D-galactopiranosido, 3-(octiloxi)-2-hidroxipropilo-beta-D-galactopiranosido, 3-

(noniloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido, 3-
 (deciloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido, 3-
 (dodeciloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido, 3-
 (tetradeciloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido,
 3-(hexadeciloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido,
 3-(octadeciloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido,
 3-(eicosiloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido, 3-
 (docosiloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido, 3-
 (tetracosiloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido,
 3-(hexeniloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido, 3-
 (dec eniloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido, 3-
 (dodeceniloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido, 3-
 (tetradeceniloxi)-hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido,
 3-(hexadeceniloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-
 galactopiranosido, 3-(octadeceniloxi)-2-hidroxiopropil-beta-
 D-galactopiranosido, 3-(docoseniloxi)-2-hidroxiopropil-beta-
 D-galactopiranosido, (tetracoseniloxi)-2-hidroxiopropil-
 beta-D-galactopiranosido, 3-(3-oxa-trideciloxi)-2-
 hidroxiopropil-beta-D-galactopiranosido, 3-
 (fluorododeciloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-
 galactopiranosido, 3-(butiloxi)-2-hidroxiopropilo-beta-D-
 glucopiranosido, 3-(octiloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-
 manopiranosido, 3-(tetradeciloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-
 lactósido, 3-(octadeciloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-
 maltósido, 3-(octiloxi)-2-hidroxiopropil-beta-D-

galactotriosido y 3-(dodeciloxi)-2-hidroxipropil-beta-D-celotriosido. Tensioactivos combinados de sacárido polietilenoóxido:

[00174] Los ejemplos no limitantes de tensioactivos en esta categoría incluyen: cocoato de sorbitán PEG-20, diisoestearato de sorbitán PEG-40, isoestearato de sorbitán PEG-2, isoestearato de sorbitán PEG-5, isoestearato de sorbitán PEG-20, lanolato de sorbitán PEG-40, Lanolato de sorbitán PEG-75, laurato de sorbitán PEG-10, laurato de sorbitán PEG-40, laurato de sorbitán PEG-44, laurato de sorbitán PEG-75, laurato de sorbitán PEG-80, oleato de sorbitán PEG-3, oleato de sorbitán PEG-6, PEG- 80 palmitato de sorbitán, perisoestearato de sorbitán PEG-40, peroleato de sorbitán PEG-40, estearato de sorbitán PEG-3, estearato de sorbitán PEG-6, estearato de sorbitán PEG-40, estearato de sorbitán PEG-60, tetraoleato de sorbitán PEG-20, sorbitán PEG-30 tetraoleato, tetraoleato de sorbitán PEG-40, tetraoleato de sorbitán PEG-60, tetraoleato de sorbitán PEG-60, triisoestearato de sorbitán PEG-20, triisoestearato de sorbitán PEG-160, trioleato de sorbitán PEG-18, hexaoleato de sorbeth-40 (anteriormente sorbitol PEG-40), Hexaoleato de sorbeth-50 (anteriormente hexaoleato de sorbitol PEG-50), Sorbeth-30 t laurato de etraoleato (anteriormente laurato de tetraoleato de sorbitol PEG-30) y tetraestearato de sorbeth-60 (anteriormente tetraestearato

de sorbitol PEG-60). Tensioactivos de Éster de Sacárido:

Los grupos funcionales de azúcar, después de la condensación con un ácido graso, forman ésteres de sacáridos. Se supone que todos los azúcares están unidos a través de un enlace éster formado a partir de una reacción de condensación con un ácido carboxílico de un ácido maleico hidrolizado o ácido graso libre y un grupo alcohol del azúcar. Existen múltiples métodos químicos para formar ésteres de ácidos grasos y azúcares. La esterificación también puede ocurrir enzimáticamente, más típicamente con una variedad de lipasa. Ejemplos no limitantes de tensioactivos de éster de sacárido incluyen: monolaurato de sorbitán, oleato de manitan, pentaacetato de glucosa, laurato de maltitol, isoestearato de rafinosa, miristato de rafinosa, oleato de rafinosa, acetato de sacarosa isobutirato, acetato de sacarosa/estearato de sacarosa, dilaurato de cocoato de sacarosa, benzoato de sacarosa dipalmitato, diestearato de sacarosa, hexaerucato de sacarosa, hexaoleato/hexapalmitato/hexastearato de sacarosa, hexapalmitato de sacarosa, laurato de sacarosa, miristato de sacarosa, octaacetato de sacarosa, oleato de sacarosa, palmitato de sacarosa, palmitato/estearato de sacarosa o estearato de sacarosa-palmitato de sacarosa, estearato de sacarosa-palmitatohidrato de sacarosa polibehenato de sacarosa, polialgodonsedato de sacarosa,

polilaurato de sacarosa, polilinooleato de sacarosa, polioleato de sacarosa, polisoyato de sacarosa, poliestearato de sacarosa, estearato de sacarosa, tetrahidroxiestearato de sacarosa, tetraisoestearato de sacarosa, tetraisoestearato de sacarosa, triacetato de sacarosa, tri-estearato de sacarosa, tri-estearato de sacarosa, monolaurato de sorbitán, oleato de manitan, laurato de eritritol, miristato de eritritol, monolaurato de sacarosa, monolaurato de maltosa, monolaurato de lactosa; monodecanoato de sacarosa, monodecanoato de maltosa, monodecanoato de lactosa; y monooctanoato de sacarosa, monooctanoato de maltosa, monooctanoato de lactosa, monoestearoil xiloglucano y laurato de fructosa.

Sulfonación de tensioactivos a base de azúcar:

Los ésteres de azúcares sulfonados generalmente dan una mejor solubilidad que los ésteres de azúcares solos, lo que permite una mayor solubilidad de los tensioactivos de cadena larga de alquilo (estearato). Tensioactivos a base de azúcar amida:

Esta categoría de tensioactivos puede caracterizarse por una amida que une los grupos de cabeza de azúcar hidrófilos a una cola lipófila.

Tensioactivos aminoalcohol:

Esta clase de tensioactivo tiene generalmente la fórmula: $R-C(=O)-NH-X-OH$, donde R es generalmente, un

alquilo C₈ a C₄₀, y X puede ser una cadena alquilo C₁ a C₁₀. En algunas realizaciones, R puede ser un alquilo C₄ a C₂₀, alquilo C₅ a C₁₈, alquilo C₆ a C₁₇, alquilo C₇ a C₁₆ o un alquilo C₈ a C₁₅. Un ejemplo no limitante de un tensioactivo: cocamida monoetanolamina, en la que R es un alquilo C₁₁.

Tensioactivos a base de aminoácidos:

Los ejemplos no limitantes de esta clase de tensioactivos incluyen: ácido lauroil glutámico, cocoil glicinato de sodio, ácido N-dodecanoilaminomalónico y ácido N-dodecanoilaspártico.

Tensioactivos de poliol:

Una molécula con más de dos grupos hidroxilo es un poliol. Son relativamente fáciles de unir a un ácido graso u otro grupo no polar que comprende un grupo de ácido carboxílico por condensación del ácido carboxílico y el alcohol en un éster de ácido graso. Los ejemplos no limitantes de grupos poliol polares que pueden unirse a un grupo no polar deseado incluyen: poliglicerol y pentaeritritol. Un ejemplo no limitante de un tensioactivo de poliol es el laurato de polilíglicerilo.

Grupos polares zwiteriónicos:

Los ejemplos no limitantes de grupos polares zwiteriónicos incluyen: glicinato, betaína, sultaínas (a veces denominadas sulfobetainas), hidroxisultaína,

etanolamida, amonioalquil sulfatos (fórmula general: $R-N^+(CH_2)_2XSO_4^-$, donde X es una cadena alquilo de 1 a 6 carbonos, más típicamente 3 carbonos) y fospocolinas. Ejemplos no limitantes de tensioactivos en esta categoría incluyen: lisofosfolípidos, foscolinas, cocoamidilpropil betaína, cocohidroxisultaína, cocamidopropil hidroxisultaína, capril sultaína cetil/lauril/miristil hidroxisultaína, coco-sultaína, hidroxisultaína lauramisultaína, sultaína miristamidopropil hidroxisultaína, miristil sultaína, oleamidopropil hidroxisultaína y seboamidopropil hidroxisultaína y lisofosfolípido c.

[00175] Los tensioactivos adecuados para su uso en la presente invención tienen un diámetro agregado. Como se usa en este documento, el término "diámetro agregado" se refiere al tamaño de un agregado de tensioactivo en condiciones acuosas, medido por dispersión dinámica de luz. Un "diámetro promedio de agregado" se refiere al promedio del tamaño de una pluralidad de agregados tensioactivos en un ambiente acuoso medido por dispersión dinámica de luz. El término "diámetro promedio del agregado" se puede usar de manera intercambiable en el presente documento con el término "diámetro agregado". En la sección de Ejemplos de este documento se proporcionan ejemplos, sin limitación, de cómo medir un diámetro promedio de agregado.

[00176] La asociación de tensioactivos con restos que no son agua se usa a menudo para estabilizar contaminantes en una solución acuosa. La modificación de las regiones de cabeza y cola de un tensioactivo puede alterar sustancialmente la morfología de la formación de un agregado de tensioactivo, un equilibrio de lípidos hidrófobos de la molécula y, en consecuencia, la capacidad del agregado de tensioactivo para unir y estabilizar varios contaminantes en una solución. Por ejemplo, modificar la longitud de la cadena alquilo de un tensioactivo puede modificar el equilibrio lipídico hidrófobo de la molécula de tensioactivo, lo que puede tener un efecto sobre la forma del agregado, la capacidad de solubilizar aceite en agua y/o el número de agregación del tensioactivo. Los tensioactivos también pueden usarse para aumentar la eficiencia de flotación de contaminantes aumentando su asociación con microburbujas. Sin embargo, a menudo, cuando se utilizan agregados de tensioactivos solos, el agregado de tensioactivos permanece en el agua después del tratamiento, lo que hace que el agua producida sea químicamente incompatible con muchos procesos industriales, particularmente aquellos que pueden requerir una alta tensión superficial en el agua.

[00177] Como se usa en este documento, el término "polímero" se refiere a una sustancia de peso molecular

relativamente alto que es al menos parcialmente soluble en un entorno acuoso. Los polímeros se componen uniendo moléculas pequeñas, llamadas unidades monoméricas, en un número suficiente para que la adición o eliminación de una o varias unidades no cambie sustancialmente las propiedades del polímero. Una unidad monomérica se refiere al grupo de átomos, derivado de un monómero, que comprende la unidad que se repite en el polímero. (Milton Orchin, et al. in Vocabulary of Organic Chemistry p. 518 (John Wiley & Sons, 1980)). Las unidades monoméricas se pueden unir de manera repetitiva regular o repetitiva irregular.

[00178] En algunas realizaciones, el polímero en una composición de nanorred puede estar compuesto por dos unidades monoméricas diferentes. En algunas realizaciones, el polímero en una composición de nanorred puede estar compuesto por tres unidades monoméricas diferentes. En algunas realizaciones, el polímero en una composición de nanorred puede estar compuesto por una pluralidad de unidades monoméricas diferentes. En algunas realizaciones, el polímero en una composición de nanorred puede estar compuesto por cadenas lineales o cadenas ramificadas. En algunas realizaciones, algunas unidades monoméricas pueden ser relativamente más hidrófilas mientras que otras unidades monoméricas pueden ser relativamente más hidrófobas.

[00179] En algunas realizaciones, las diferentes unidades monoméricas que comprenden el polímero se alternan regularmente, por ejemplo, -A-B-A-B-. En algunas realizaciones, las diferentes unidades monoméricas que comprenden el polímero pueden alternar sustancialmente en un patrón diferente, por ejemplo, -A-A-B-A-A-B-. Este tipo de alternancia se puede considerar como un bloque. En algunas realizaciones, un mayor número de unidades monoméricas que comprenden el polímero puede repetirse en una secuencia mayor antes de alternar con la repetición de otra unidad monomérica en el polímero. Cuanto mayor sea el número de la misma unidad monomérica repetida, mayor será el bloque en un polímero. En algunas realizaciones de un polímero que comprende una composición de nanorred, un bloque comprende dos unidades monoméricas de un primer tipo y una unidad monomérica de un segundo tipo. En otras realizaciones, un bloque puede comprender dos unidades monoméricas de un primer tipo, una unidad monomérica de un segundo tipo y una unidad monomérica de tercer tipo.

[00180] En algunas realizaciones, el polímero que comprende la composición de nanorred tiene al menos una unidad monomérica hidrofílica y al menos una unidad monomérica hidrofóbica. El polímero en una composición de nanorred se puede preparar a partir de un copolímero de estireno-ácido maleico. El polímero en una composición de

nanorred puede ser copolímero de estireno-anhídrido maleico hidrolizado. En algunas realizaciones, el polímero puede ser copolímero de diisobutileno-anhídrido maleico hidrolizado (DIB-co-anhídrido maleico). Como con SMA, el anhídrido DIB-co-maleico no es soluble en solución acuosa, pero se vuelve soluble cuando al menos una porción de la unidad monomérica de anhídrido maleico se hidroliza a la forma de ácido dicarboxílico. Lo que sigue es válido para cada uno de SMA y DIB-co-anhídrido maleico, y una forma resultante que contiene ácido dicarboxílico soluble en agua a partir del mismo. Debe apreciarse en el presente documento que SMA se usa a menudo en este documento como una abreviatura de copolímeros de estireno-ácido málico y DIBMA se usa como una abreviatura de copolímeros de diisobutileno-anhídrido maleico y que tales abreviaturas son específicas del contexto y estas dos abreviaturas pueden referirse a tanto la forma hidrolizada como la no hidrolizada de estos copolímeros y un experto en la técnica podrán identificar fácilmente si el copolímero está o no en forma hidrolizada. El uso de las abreviaturas hSMA y hDIBMA siempre se refiere a la forma hidrolizada de estos copolímeros.

[00181] El SMA es generalmente insoluble en soluciones acuosas. Para aumentar la solubilidad de SMA, el polímero se puede calentar en una solución de pH básico que

conduce a que al menos una parte de las unidades de anhídrido maleico en el polímero se hidrolice, formando así hSMA. Esto significa que una parte de las unidades repetidas de anhídrido maleico en hSMA se convierte químicamente en grupos CH adyacentes, cada uno de los cuales lleva un grupo ácido carboxílico colgante. Químicamente, esta unidad repetitiva de ácido dicarboxílico en hSMA puede expresarse como sigue: $-\text{CH}(\text{COOH})-\text{CH}(\text{COOH})-$, o una forma de sal del mismo en donde una o ambas unidades de ácido carboxílico adyacentes pueden estar en forma de ácido protonado, o una sal del mismo. En algunas realizaciones, las unidades de ácido carboxílico adyacentes pueden estar en forma de sal con un solo catión divalente o multivalente. Por ejemplo, cationes divalentes y multivalentes tales como, pero sin limitarse a, iones amoniacos, iones calcio, iones magnesio o iones hierro ferroso o férrico.

[00182] En algunas realizaciones de una composición de nanorred, el porcentaje de hidrólisis de SMA a hSMA (o DIB-co-anhídrido maleico a hDIBMA) es una cantidad eficaz para solubilizar sustancialmente el polímero en solución acuosa en condiciones para la formación de nanorred. En algunas realizaciones, sustancialmente todas las unidades de ácido maleico se hidrolizan para crear unidades de repetición de ácido dicarboxílico en la cadena de polímero.

En algunas realizaciones, no todas las unidades de ácido maleico se hidrolizan.

[00183] En algunas realizaciones, al menos una unidad monomérica hidrófila es anhídrido maleico hidrolizado a ácido maleico o una sal del mismo y que tiene la fórmula química general: $[-CH(COR^6)CH(COR^7)-]$. En algunas realizaciones, está presente un número suficiente de unidades monoméricas de ácido maleico (por hidrólisis de algunas unidades monoméricas de anhídrido maleico) para que el polímero se disuelva en solución acuosa en una concentración suficiente para formar una composición de nanorred (ver Figura 14). Cuando todas las unidades monoméricas de anhídrido maleico en el polímero están completamente hidrolizadas (por ejemplo, polímero 2000), R^6 y $R^7 = OH$ (grupo funcional ácido carboxílico).

[00184] En algunas realizaciones, algunas de las unidades monoméricas de anhídrido maleico en el polímero pueden modificarse cambiando de ese modo uno cualquiera o más de R^6 , R^7 o ambos. Por ejemplo, uno cualquiera o más de R^6 , R^7 , o ambos pueden ser OR^1 , OR^2 , NHR^1 , NHR^2 , NR^1_2 , NR^2_2 , y SR^1 . Esta modificación se puede lograr mediante una o más reacciones de sustitución, desplazamiento o condensación conocidas por los expertos en la técnica, incluidas, entre otras, las que se establecen en la sección de Ejemplos.

[00185] R^6 , R^7 o ambos, R^1 , R^2 o ambos, pueden ser un

grupo colgante que funcionaliza la unidad monomérica de ácido maleico en un polímero que comprende una composición de nanorred. Por ejemplo, cualquiera de los grupos R de este párrafo puede ser uno o más de hidrógeno, C_1 - C_{40} , cadena lineal o ramificada, saturado, monoinsaturado o poliinsaturado, cíclico alifático o cíclico aromático, policíclico, un azúcar, piridina, pirimidina, purina, ciclodextrina, indol, isoindol, glucósidos y piperazina. En algunas realizaciones, el cíclico aromático está alquilado.

[00186] En algunas realizaciones, el polímero tiene unidades monoméricas hidrófobas que comprenden un polímero que incluye una cadena de carbono insaturado que tiene entre uno y diez átomos de carbono adicionales. Por ejemplo, estireno, p-metilestireno, cloroestireno, 2-cloroestireno, 4-cloroestireno, fluoroestireno, bromoestireno, propileno, isobutileno, isopreno y mezclas de los mismos.

[00187] En otras realizaciones, la unidad monomérica hidrofóbica puede ser una cadena lineal o ramificada, saturada, monoinsaturada o poliinsaturada, cíclica alifática, policíclica, cíclica aromática que tiene al menos un anillo aromático. En algunas realizaciones, el cíclico aromático está alquilado. Generalmente, la unidad monomérica hidrófoba tiene desde 3 hasta 10 átomos de carbono.

[00188] Los polímeros adecuados para su uso en la presente invención tienen un diámetro medio de partícula. Como se usa en este documento, "diámetro de partícula" se refiere al tamaño de un polímero en condiciones acuosas medido por dispersión dinámica de luz. "Diámetro teórico del polímero" se refiere al diámetro mínimo teórico de una esfera de polímero compacto que puede calcularse como se describe a continuación. Un "diámetro medio de partícula" se refiere a la media del tamaño de una pluralidad de polímeros en un entorno acuoso medido por dispersión dinámica de luz. El término "diámetro medio de partícula" se puede utilizar de forma intercambiable en este documento con el término "diámetro de partícula". En la sección de Ejemplos de este documento se proporcionan ejemplos, sin limitación, de cómo medir un diámetro medio de partícula.

[00189] Los polímeros pueden ser polímeros largos o polímeros cortos. Como se usa en el presente documento, el término "polímero largo" se refiere a un polímero con un peso molecular superior a 40.000 g/mol, y/o una longitud de contorno superior a 100 nm. Como se usa en este documento, el término "polímero corto" se refiere a un polímero que tiene un peso molecular por debajo de 40.000 Da, y/o una longitud de contorno por debajo de 100 nm.

[00190] En algunas realizaciones, los grupos funcionales de los polímeros adecuados para su uso en

nanorredes interactúan con cationes divalentes y trivalentes, como el ácido maleico. La adición de metales catiónicos divalentes y trivalentes neutraliza una carga negativa del grupo carboxilato presente en el ácido maleico, precipitando así el polímero. La asociación correspondiente entre el copolímero de bloques funcionalizado con ácido maleico con un agregado de tensioactivo hace que el agregado de tensioactivo sea sensible a los cationes. Por lo tanto, la adición de una nanorred en soluciones que contienen altas concentraciones de cationes divalentes y trivalentes precipitará todo el complejo de nanorred y cationes. En algunos casos, concentraciones adecuadamente altas de cationes monovalentes también pueden precipitar todo el complejo de nanorredes y cationes asociados. Este precipitado resultante es de naturaleza hidrófoba y se une a restos que no son agua, como los hidrocarburos. A medida que pasa el tiempo, los precipitados comienzan a flocular, por lo que aumentan de tamaño y se vuelven más fáciles de eliminar de la solución por medios físicos como la sedimentación o la flotación. Si el tensioactivo y el polímero se añaden secuencialmente a soluciones que contienen grandes concentraciones de un precipitante específico de polímero, el efecto de floculación y unión de la fracción no acuosa del tensioactivo se pierde porque el polímero precipita

inmediatamente como partículas individuales y el componente tensioactivo permanece libre para disociarse en solución. En los casos en los que un precipitante que actúa sobre el tensioactivo está presente en solución, la adición secuencial de polímero y detergente dará como resultado precipitados separados de polímero y tensioactivo y se perderá el efecto floculante.

[00191] Las realizaciones ilustrativas de esta invención proporcionan una nanorred que comprende:

a) un agregado de tensioactivo que tiene un diámetro promedio de agregado; y

b) un polímero que tiene un diámetro medio de partícula cuyo diámetro medio de partícula es igual o menor que el diámetro medio del agregado. La nanorred resultante tiene a menudo un diámetro mayor que el diámetro medio de las partículas.

[00192] Otras realizaciones ilustrativas de esta invención proporcionan una nanorred que comprende:

a) un agregado de tensioactivo que tiene un diámetro promedio de agregado; y

b) un polímero que tiene un diámetro medio de partícula cuyo diámetro medio de partícula es igual o menor que el diámetro medio del agregado. La nanorred resultante a menudo tiene un diámetro mayor que el diámetro medio de las partículas. Se excluyen específicamente de estas

realizaciones las nanorredes en las que ambos:

1) el tensioactivo se selecciona del grupo que consta de: Triton X-100™, Triton X-305™, N-dodecil-beta-D-maltósido (DDM), oleato de sodio, colato de sodio, desoxicolato de sodio (DOC), beta-octilglucósido (Beta-OG) y n-óxido de lauril dimetilamina (LDAO); y

2) el polímero se selecciona del grupo que consiste en: SMA-2000™, SMA-2021™ y ácido Di-isobutileno-co-maleico (DIBMA).

[00193] Para mayor claridad, las realizaciones en las que el tensioactivo se selecciona de Triton X-100™, Triton X-305™, DDM, oleato de sodio, colato de sodio, DOC, Beta-OG y LDAO se incluyen en la presente invención siempre que el polímero no es exclusivo y único de SMA-2000™, SMA-2021™ o DIBMA. De manera similar, las realizaciones en las que el polímero se selecciona del grupo que consiste en: SMA-2000™, SMA-2021™ y DIBMA también se incluyen en la presente invención siempre que el tensioactivo no sea exclusivo y solo uno de Triton X-100™, Triton X-305™, DDM, oleato de sodio, colato de sodio, DOC, Beta-OG o LDAO.

[00194] En algunas otras realizaciones aún, el tensioactivo no es un fosfolípido. En algunas otras realizaciones aún, el tensioactivo no es un lípido.

[00195] Seleccionando una relación entre el diámetro medio del agregado de tensioactivo y el diámetro medio de

las partículas del polímero en el intervalo de $1 \leq 1$, se puede predecir que se producirá la formación de nanorretas. A menudo, es preferible seleccionar una relación entre el diámetro medio del agregado de tensioactivo y el diámetro medio de las partículas del polímero en el intervalo de $1 < 1$. A menudo, es preferible seleccionar una relación entre el diámetro medio del agregado de tensioactivo y el diámetro medio de las partículas del polímero en el rango de $1 < 1$, donde < 1 es cercano a 1, pero aún menor que 1. Esto permite el diseño de nanorredes con diferentes tensioactivos. y polímeros variables que sean estables y que probablemente contengan un elevado número de moléculas tensioactivas. Al aumentar la captura de moléculas de tensioactivo en nanorredes, también se pueden seleccionar parámetros físicos que pueden ser importantes para la aplicación posterior de las partículas.

[00196] Cuando se seleccionan materiales para la preparación de una nanorred, un agregado de tensioactivo tiene preferiblemente un diámetro de agregado promedio mayor que el diámetro de partícula promedio de un polímero. Esto limita la elección de tensioactivos adecuados que pueden incorporarse en una nanorred para un tamaño determinado de polímero; cuanto más corto es el polímero, más variedades de nanorredes se pueden formar. Sin embargo, con el aumento de la longitud del polímero, las nanorredes,

que comprenden un tensioactivo que tiene un tamaño de diámetro agregado promedio que es mayor o del mismo tamaño en comparación con el diámetro de partícula promedio del polímero, pueden conducir a nanorredes más pequeñas y estables que pueden mostrar una mayor eficiencia de floculación y/o características de flotación. Por lo tanto, la selección de polímeros más largos y la selección de tensioactivos adecuados en función de la relación entre el diámetro medio del agregado y el diámetro medio de las partículas del polímero seleccionado proporciona una formación estable de nanorred con propiedades ventajosas.

[00197] En condiciones de formación preferidas, un polímero, cuando está en una partícula de polímero compacto, tiene un diámetro medio de partícula ligeramente menor que el tamaño del diámetro medio del agregado de tensioactivo. En condiciones acuosas y utilizando un ligero exceso de polímero, el tensioactivo y el polímero se autoensamblarán en nanorredes, lo que conducirá a un aumento de la materia precipitada en solución (Fig. 1A). Un ejemplo de esta relación como se muestra en los ejemplos siguientes, donde SMA-2000™ (4 nm de diámetro, 14 nm de longitud) y Triton X-100™ (5,3 nm de diámetro, 16,6 nm de circunferencia) forman una nanorred (5,1 nm de diámetro, 16 nm de circunferencia) en una relación de 1:1 peso/peso.

[00198] Un agregado de tensioactivo puede ser

demasiado grande para ser abarcado por una única cadena de polímero. Esto puede conducir a la división del agregado de tensioactivo original en nanorredes más pequeñas (Fig.1C), similar a la acción de solubilización de SMA en bicapas lipídicas (Dorr, J.M., Koorengevel, M.C., Schafer, M., Prokofyev, A.V., Scheidelaar, S., van der Cruijssen, E.A.w., Dafforn, T.R., Baldus, M., Killian. J.A. Detergent-free isolation of KcsA in nanodiscs. PNAS. Dec 2014, 111 (52) 18607-18612). Este reparto de tensioactivo entre polímeros se ejemplifica en los Ejemplos siguientes con PGL1, que se solubilizó en partículas de 25 nm tanto en SMA-2000™ como en SMA-725™ (Tabla 4). Sin embargo, múltiples polímeros también pueden asociarse alrededor de un gran agregado de tensioactivo, lo que en algunos casos puede conducir a un aumento en el tamaño de la nanorred en comparación con el diámetro promedio del agregado de tensioactivo (Fig. 1D).

[00199] Un agregado de tensioactivo también puede ser demasiado pequeño para una longitud determinada de polímero (Figuras 2A y 2B, triángulos). Sin embargo, mientras que un agregado de tensioactivo grande puede formar una nanorred con un polímero más pequeño, un agregado de tensioactivo que es demasiado pequeño permanecerá separado y no formará una nanorred con un polímero más grande. Por ejemplo, como se establece en los ejemplos a continuación, los agregados Triton X-100™ y

Triton X-305™ son demasiado pequeños para formar nanorredes de manera eficiente con el polímero SMA-725™ grande, pero pueden formar nanorredes con el polímero SMA-2000™ más pequeño. Esto puede deberse al panorama de energía libre que gobierna la asociación de moléculas anfipáticas. Pueden formarse agregados tensioactivos debido al equilibrio del costo entrópico de un ensamblaje multimolecular con la energía libre conservada al proteger las cadenas alquilo hidrófobas de la solución acuosa. Esta protección de los grupos hidrófobos del agua también se produce en los polímeros SMA, que formarán estructuras de partículas compactas en soluciones acuosas tamponadas. Una partícula de polímero compacta representa la formación de diámetro más pequeño que puede adoptar un polímero. En el caso de un agregado de tensioactivo pequeño y un polímero grande, un aumento en el tamaño tanto del tensioactivo como del polímero causado por su asociación sería, por lo tanto, entrópicamente inapreciable y no ocurriría en ausencia de otro factor (Fig. 1B). Los posibles factores pueden ser contribuciones entálpicas tales como enlaces de hidrógeno, puentes de sal o interacciones electrostáticas entre el tensioactivo y el polímero.

[00200] En algunas realizaciones, es posible determinar el ensamblaje de nanorred usando la siguiente fórmula:

Volumen de la columna vertebral, átomo que no es de hidrógeno (C, O, S, N) $\approx 20 \text{ \AA}^3$

Volumen de anillo aromático = $84 \text{ \AA}^3$

[00201] Diámetro del agregado de tensioactivo
 $(D_{\text{agregado}}) = 2 \times ((n \times V_{\text{sur}})/\pi/4 \times 3)^{1/3}$, donde V es el volumen calculado de un monómero de tensioactivo y n es el número de moléculas de tensioactivo en el agregado de tensioactivo.

[00202] Diámetro de una micela de polímero compacto
 $(D_{\text{polímero}}) = 2 \times ((n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}})/\pi/4 \times 3)^{1/3}$, donde V es el volumen calculado del bloque de polímero y n es el número de bloques en una sola cadena de polímero.

[00203] Cálculo del diámetro del polímero compacto
 SMA-2000™: $Mw_{\text{bloque}} = 324 \text{ g/mol}$; (2 estireno, 1 ácido maleico), $Mw_{\text{SMA2000}} \approx 7500 \text{ g/mol}$

$$n_{\text{bloque}} = Mw_{\text{polímero}}/Mw_{\text{bloque}} \approx 23;$$

$V_{\text{bloque}} = 2 \text{ anillos aromáticos, } 8 \text{ átomos de carbono, } 4 \text{ átomos de oxígeno} = 408 \text{ \AA}^3$;

$$V_{\text{polímero}} = n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}} = 23 \times 408 \text{ \AA}^3 = 9.384 \text{ \AA}^3;$$

$$D_{\text{polímero}} = 2 \times ((n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}})/\pi/4 \times 3)^{1/3} = 2 \times ((9,384 \text{ \AA}^3)/\pi/4 \times 3)^{1/3} = 26 \text{ \AA} = 2,6 \text{ nm}$$

[00204] Cálculo del diámetro del polímero compacto
 SMA-2021™: $Mw_{\text{bloque}} = 324 \text{ g/mol}$; (2 estireno, 1 ácido maleico), $Mw_{\text{SMA2021}} \approx 22,000 \text{ g/mol}$

$$n_{\text{bloque}} = Mw_{\text{polímero}}/Mw_{\text{bloque}} \approx 68$$

$V_{\text{bloque}} = 2$ anillos aromáticos, 8 átomos de carbono, 4 átomos de oxígeno = $408 \text{ \AA}^3$;

$$V_{\text{polímero}} = n_{\text{bloque}} * V_{\text{bloque}} = 68 \times 408 \text{ \AA}^3 = 27,744 \text{ \AA}^3;$$

$$D_{\text{polímero}} = 2 \times ((n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}}) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 2 \times ((27.744 \text{ \AA}^3) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 37 \text{ \AA} = 3,7 \text{ nm}$$

[00205] Cálculo del diámetro del polímero compacto SMA-725™: $Mw_{\text{bloque}} = 428 \text{ g/mol}$; (3 estireno, 1 ácido maleico), $Mw_{\text{SMA725}} \approx 130.000 \text{ g/mol}$

$$n_{\text{bloque}} = Mw_{\text{SMA725}} / Mw_{\text{bloque}} \approx 308$$

$V_{\text{bloque}} = 3$ anillos aromáticos, 10 átomos de carbono, 4 átomos de oxígeno = $532 \text{ \AA}^3$;

$$V_{\text{polímero}} = n_{\text{bloque}} * V_{\text{bloque}} = 308 \times 532 \text{ \AA}^3 = 163.856 \text{ \AA}^3;$$

$$D_{\text{polímero}} = 2 \times ((n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}}) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 2 \times ((163.856 \text{ \AA}^3) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 68 \text{ \AA} = 6,8 \text{ nm}$$

[00206] Cálculo del diámetro del polímero compacto SMA-3000™: $Mw_{\text{bloque}} = 428 \text{ g/mol}$; (3 estireno, 1 ácido maleico), $Mw_{\text{SMA3000}} \approx 9.000 \text{ g/mol}$

$$n_{\text{bloque}} = Mw_{\text{SMA3000}} / Mw_{\text{bloque}} \approx 21$$

$V_{\text{bloque}} = 3$ anillos aromáticos, 10 átomos de carbono, 4 átomos de oxígeno = $532 \text{ \AA}^3$

$$V_{\text{polímero}} = n_{\text{bloque}} * V_{\text{bloque}} = 21 \times 532 \text{ \AA}^3 = 11.172 \text{ \AA}^3;$$

$$D_{\text{polímero}} = 2 \times ((n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}}) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 2 \times ((11,172 \text{ \AA}^3) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 28 \text{ \AA} = 2,8 \text{ nm}$$

[00207] Cálculo del diámetro del polímero compacto SMA-IBE: $Mw_{\text{bloque}} = 220.2 \text{ g/mol}$; (1 estireno, 1 ácido

maleico), $M_{V_{SMA-IBE}} \approx 65.000 \text{ g/mol}$

$$n_{\text{bloque}} = M_{V_{\text{polímero}}} / M_{W_{\text{bloque}}} \approx 295$$

$V_{\text{bloque}} = 1$ anillo aromático, 6 átomos de carbono, 4 átomos de oxígeno = $284 \text{ \AA}^3$,

$$V_{\text{polímero}} = n_{\text{bloque}} * V_{\text{bloque}} = 295 \times 284 \text{ \AA}^3 = 83,780 \text{ \AA}^3;$$

$$D_{\text{polímero}} = 2 \times ((n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}}) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = ((83,780 \text{ \AA}^3) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 54 \text{ \AA} = 5,4 \text{ nm}$$

[00208] Cálculo del diámetro del polímero compacto terminado en SMA-cumeno: $M_{W_{\text{bloque}}} = 428 \text{ g/mol}$; (3 estireno, 1 ácido maleico), $M_{W_{\text{Cumene}}} = 152 \text{ g/mol}$ $M_{W_{SMA-Cumene}} \approx 1500 \text{ g/mol}$

$$n_{\text{block}} = M_{W_{SMA-Cumene}} - M_{W_{\text{Cumene}}} / M_{W_{\text{bloque}}} \approx 3.1$$

$V_{\text{bloque}} = 3$ anillos aromáticos, 10 átomos de carbono, 4 átomos de oxígeno = $532 \text{ \AA}^3$,

$$V_{\text{polímero}} = n_{\text{bloque}} * V_{\text{bloque}} + V_{\text{cumene}} = (3,1 \times 532) + 144 \text{ \AA}^3 = 1.819 \text{ \AA}^3;$$

$$D_{\text{polímero}} = 2 \times ((n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}}) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 2 \times ((1.819 \text{ \AA}^3) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 15 \text{ \AA} = 1,5 \text{ nm}$$

[00209] Cálculo del diámetro del polímero compacto DIBMA: $M_{W_{\text{bloque}}} = 226 \text{ g/mol}$; (18 átomos de hidrógeno, 12 átomos de carbono, 4 átomos de oxígeno), $M_{W_{\text{DIBMA}}} \approx 12.000 \text{ g/mol}$

$$n_{\text{bloque}} = M_{W_{\text{DIBMA}}} / M_{W_{\text{bloque}}} \approx 53$$

$V_{\text{bloque}} = 12$ átomos de carbono, 4 átomos de oxígeno = $320 \text{ \AA}^3$,

$$V_{\text{polímero}} = n_{\text{bloque}} * V_{\text{bloque}} = 53 \times 320 \text{ \AA}^3 = 16.960 \text{ \AA}^3;$$

$$D_{\text{polímero}} = 2 \times ((n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}}) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 2 \times ((16,960 \text{ \AA}^3) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 32 \text{ \AA} = 3,2 \text{ nm}$$

[00210] Cálculo del diámetro del polímero compacto SMA-2000™ derivado de etanol: $M_{w_{\text{bloque}}} = 367 \text{ g/mol}$; (22 átomos de carbono, 4 átomos de oxígeno, 1 átomo de nitrógeno, 25 átomos de hidrógeno), $M_{w_{\text{Derivado del etanol SMA2000}}} \approx 8495 \text{ g/mol}$

$$n_{\text{bloque}} = M_{w_{\text{polímero}}} / M_{w_{\text{bloque}}} \approx 23;$$

$V_{\text{bloque}} = 2$ anillos aromáticos, 10 átomos de carbono, 4 átomos de oxígeno, 1 átomo de nitrógeno = $468 \text{ \AA}^3$;

$$V_{\text{polímero}} = n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}} = 23 \times 468 \text{ \AA}^3 = 10.764 \text{ \AA}^3;$$

$$D_{\text{polímero}} = 2 \times ((n_{\text{bloque}} \times V_{\text{bloque}}) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 2 \times ((10.764 \text{ \AA}^3) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 27 \text{ \AA} = 2,7 \text{ nm}$$

[00211] Cálculo del diámetro del agregado de tensioactivo x-100™:

$$(D_{\text{agregado}}) = 2 \times ((n \times V_{\text{sur}}) / \pi / 4 \times 3)^{1/3}$$

$N_{\text{tensioactivo}} = 100-155$, $V_{\text{tensioactivo}} = 10$ átomos de oxígeno, 29 átomos de carbono, 1 anillos aromáticos = $864 \text{ \AA}^3$

$$(D_{\text{agregado}}) = 2 \times ((100 \times 864 \text{ \AA}^3) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 21 \text{ \AA}^3 = 52 \text{ \AA} = 5,2 \text{ nm}.$$

[00212] Para Tx-100, $D_{\text{agregado}} > D_{\text{SMA2000}}$; Se predice la formación de nanorred. $D_{\text{agregado}} < D_{\text{SMA725}^{\text{TM}}}$; La formación de nanorred es incompatible con SMA725™. $D_{\text{agregado}} > D_{\text{SMA2021}}$ Se predice la formación de nanorred.

[00213] Cálculo del diámetro del agregado de

tensioactivo Triton x-305™:

$$(D_{\text{agregado}}) = 2 \times ((n \times V_{\text{sur}})) / \pi / 4 \times 3)^{1/3}$$

$N_{\text{tensioactivo}} = 30$, $V_{\text{tensioactivo}} = 30$ átomos de oxígeno, 69 átomos de carbono, 1 anillo aromático = $3.684 \text{ \AA}^3$

$(D_{\text{agregado}}) = 2 \times ((30 \times 3,684 \text{ \AA}^3)) / \pi / 4 \times 3)^{1/3} = 59.5 \text{ \AA} \approx 6 \text{ nm}$.

[00214] Para Triton x-305™, $D_{\text{agregado}} > D_{\text{SMA2000}}$; Se predice la formación de nanorred con SMA-2000™. $D_{\text{agregado}} < D_{\text{SMA725}}$; La formación de nanorred es incompatible con SMA-725™. $D_{\text{agregado}} > D_{\text{SMA2021}}$ Se predice la formación de nanorred.

Tabla 1: Diámetros de Polímeros y Tensioactivos Seleccionados.			
	MW	Diámetro Estimado	Diámetro Medido
SMA 2000™	7,500 Da	2.6 nm*	4 nm
SMA 2021™	22,000 Da	3.7nm*	NFA
SMA 725™	130,000 Da	6.8 nm*	10 nm
Triton X-100™	650 Da	5.4 nm	5 nm
Triton X-305™	1500 Da	6 nm	9 nm
Triton X-45™	400 Da	NFA	91 nm

* Suponiendo un polímero completamente compactado en forma generalmente esférica.

[00215] En algunas realizaciones ilustrativas de la presente invención, el tensioactivo se selecciona del grupo que consiste en: PGL1, PGL2, PGL3, PGL4, PGL5, Triton X-45™, Triton X-100™, Triton X-305™, oleato de sodio, oleato

de potasio, LDAO, monolaurato de polioxietilensorbitán, monooleato de polioxietilensorbitán, miristato de polioxietilensorbitán, sorbitán polioxietilen sorbitano, polioxietilen sorbitán palmitato, lauramidopropil betaína, cocoil glicinato, monoéster de laurato de glucosa, laurato de sacarosa, monooleato de sacarosa, palmitato de sacarosa, monolaurato de glicerilo, laurato de fructosa, oleato de potasio, ácido oleico, ácido palmítico, ácido linoleico y mezclas de los mismos. En algunas realizaciones, el tensioactivo es una mezcla de PGL5 y oleato de sodio. En algunas realizaciones, el tensioactivo es una mezcla de PGL5 y oleato de potasio.

[00216] En realizaciones ilustrativas de la presente invención, el polímero es un copolímero de bloques. En algunas realizaciones, el polímero tiene una relación de grupos hidrófobos:hidrófilos de aproximadamente 1:1 a aproximadamente 4:1, de aproximadamente 1:1 a aproximadamente 3:1, de aproximadamente 2:1 a aproximadamente 3:1, o aproximadamente 2:1. En algunas realizaciones, el polímero se selecciona del grupo que consiste en: SMA-725™, SMA 3000™, SMA-2000™ y SMA-2021™. En algunas realizaciones, el polímero es SMA- 725™.

[00217] Las nanorredes de acuerdo con la presente invención se pueden preparar mezclando, en un entorno acuoso, un polímero y un tensioactivo. A menudo es

ventajoso añadir suficiente tensioactivo de modo que la concentración de tensioactivo sea la concentración micelar concentrada (CMC). Las nanorrejas se pueden preparar en un entorno más claro y/o estéril y luego se pueden agregar a una solución acuosa para su tratamiento posterior, o se pueden proporcionar como partes separadas en un kit para mezclarlas más tarde. Las partes del kit se pueden mezclar en un ambiente limpio y/o estéril o se pueden mezclar in situ para la preparación de las nanorredes directamente en la solución acuosa a tratar.

[00218] En realizaciones ilustrativas, se proporciona un método para tratar el agua producida utilizando las nanorredes descritas en el presente documento. Un ejemplo de tal método es inyectar una solución de nanorredes en un flujo de líquido. La forma de inyección puede ser a través de cualquier método conocido por un experto en la técnica y, a menudo, a través de un eductor, tal como un eductor Venturi. La solución de nanorred se puede bombear activamente al eductor o se puede aspirar naturalmente al flujo de fluido por el efecto venturi si hay una caída de presión adecuada. La solución de nanorred puede inyectarse en el flujo de fluido sola o simultáneamente con un gas u otros productos químicos del agua. La solución de nanorred también se puede inyectar a través de una bobina de inyección seguida de un mezclador

estático. En tal caso, puede ser necesario diluir primero la solución de nanorred para facilitar la mezcla en una tubería.

Ejemplos

[00219] Los siguientes ejemplos son ilustrativos de algunas de las realizaciones de la invención descritas en el presente documento. Estos ejemplos no limitan el espíritu o alcance de la invención de ninguna manera.

[00220] En los siguientes Ejemplos, de 1 a 14, se utilizaron los siguientes métodos, reactivos y materiales.

Reactivos y materiales:

[00221] A menos que se indique lo contrario, todos los productos químicos se adquirieron de Sigma-Aldrich™ Canadá. El poliglicerol-10-palmitato (PGL5), el poliglicerol-10-oleato (PGL1), el poliglicerol-10-estearato (PGL3), el poliglicerol-10-laurato 1 (PGL2) y 2 (PGL4) se adquirieron de Shandong Binzhou New Material Technology Co.™, Ltd. El copolímero de bloques de anhídrido maleico de estireno se adquirió de Cray Valley™ (SMA-2000™) o Jiaxing Huawen Chemical Co.™, Ltd (SMA-725™).

Preparación de soluciones madre de polímero concentrado de sma-725™ y sma-2000™

[00222] Para la preparación de copolímeros de ácido estireno maleico, primero se trituro SMA-725™ hasta obtener un polvo fino, mientras que se compró SMA-2000™ en forma de

polvo. Posteriormente se incubaron 5% (peso/vol.) de SMA-725™ y SMA-2000™ prehidrolizados en hidróxido de potasio 500 mM a 80 °C con agitación durante 5 horas o hasta que la solución se hubo aclarado. Las soluciones se pasaron a través de un filtro de 10 µm para eliminar las partículas no hidrolizadas, luego se precipitaron mediante la adición gota a gota de HCl 12 M con agitación hasta $\text{pH} \leq 2$. El polímero precipitado se filtró (10 µm), se lavó 3 veces con 100 ml de HCl diluido (50 mM), 3 veces con 100 ml de agua ultrapura, luego se deja secar a temperatura ambiente durante 72 horas. La solución madre de polímero concentrada se preparó luego resuspendiendo 200 mg del polímero seco en agua ultrapura y ajustando el pH de la suspensión a 7 mediante la adición gota a gota de hidróxido de sodio. La solución de polímero transparente resultante se ajustó luego a un volumen final de 10 ml y una concentración final del 2% (peso/vol.). Todas las soluciones madre de polímero se prepararon de acuerdo con este procedimiento y se diluyeron en consecuencia en agua destilada antes de su uso.

[00223] Se utilizaron soluciones madre de polímero preparadas de acuerdo con el procedimiento inmediatamente anterior en los ejemplos expuestos en las siguientes secciones; incluso si se hace referencia a un polímero solo por su nombre o nombre comercial.

Preparación de soluciones madre de tensioactivo.

[00224] Se prepararon soluciones madre de Triton X-100™, Triton X-305™ y Triton X-45™ mezclando 300 mg de tensioactivo en un volumen final de 30 ml de agua ultrapura. Se prepararon soluciones madre de PGL1, PGL3 o PGL5, respectivamente, pesando 1 g, 500 mg o 330 mg, respectivamente. La cantidad pesada del tensioactivo seleccionado se resuspendió en 10 ml de agua ultrapura y se mezcló con un homogeneizador manual hasta que se emulsionó para producir cada solución madre de tensioactivo PGL respectiva. Para todas las demás soluciones madre de tensioactivo, se disolvieron 300 mg de tensioactivo en 30 ml de agua ultrapura para formar soluciones madre al 1%.

Ensayos de formación de nanorred:

[00225] Se mezclaron polímero concentrado (solución de reserva del 0,5% peso/vol.) y tensioactivo (solución de reserva del 1% peso/vol.) en un tubo de microcentrífuga. La cantidad de cada solución madre empleada dependió de la relación de tensioactivo a polímero deseada en los ejemplos que siguen. Las soluciones madre concentradas combinadas en el tubo de microcentrífuga se diluyeron luego hasta un volumen final de 1 ml en agua ultrapura. Los tubos se mezclaron mediante inversión manual 3 veces, se dejaron reposar durante 5 minutos y luego se introdujo 1 gota (aproximadamente 10 ul) de ácido clorhídrico 12 M para

estimular la precipitación de nanorred. Los tubos se mezclaron 3 veces por inversión, se dejaron reposar a temperatura ambiente durante 5 minutos. Para detectar la formación de nanorredes, se midió la absorbancia del contenido del tubo a 540 nm.

Medición de tamaño con dispersión dinámica de luz (dls):

[00226] Se midieron el tamaño de partícula de polímero, el tamaño de agregado de tensioactivo y el tamaño de nanorred usando dispersión de luz dinámica (Zetasizer Nano ZS™). En resumen, se prepararon soluciones de tensioactivos al 0,5% peso/vol en Tampón A (20 mM Tris-HCl {Tris (hidroximetil)aminometano}, pH 7). Los tensioactivos se mezclaron en una proporción de 1:1 (peso/peso) con el polímero indicado y se dejaron reposar durante 5 minutos a temperatura ambiente. Además, las muestras de solo polímero y solo tensioactivo, respectivamente, se mezclaron con un volumen equivalente de Tampón A y se incubaron durante un período de tiempo equivalente. Después de 5 minutos, se eliminaron los agregados grandes y el polvo de las soluciones mediante un filtro de 0,2 µm, seguido inmediatamente por la medición del tamaño mediante dispersión dinámica de la luz (absorbancia a 540 nm). Durante el dimensionamiento, las muestras se diluyeron gota a gota en Tampón A para obtener un índice de

polidispersidad óptimo ($<0,5$) para las mediciones. Los valores numéricos se tomaron como una medida del diámetro para los diámetros de agregado de tensioactivo, nanorred y partículas de polímero.

Experimentos de velocidad de floculación:

[00227] Se formaron nanorredes de oleato de sodio al 1% mediante la adición de 1:1 (p:p) del polímero SMA y oleato de sodio indicados. A continuación, las soluciones de nanorred de oleato de sodio se diluyeron al 0,02% en volumen en 1 ml de agua ultrapura y se dejaron reposar durante 5 minutos a temperatura ambiente (21 °C) en una cubeta de poliestireno. Posteriormente, las nanorredes se desestabilizaron mediante acidificación (1 gota de HCl 12 M) y se midió la absorbancia a 540 nm. La sedimentación del flóculo de nanorred de oleato de sodio precipitado se siguió a lo largo del tiempo. Como control, también se siguió el comportamiento de sedimentación de los agregados de oleato de sodio acidificados a lo largo del tiempo.

Ejemplo 1

[00228] Caracterización por tamaño de agregados tensioactivos no iónicos.

[00229] Se llevó a cabo una comparación de la formación de nanorretas con un polímero relativamente más pequeño (SMA-2000™) y un polímero SMA relativamente más grande (SMA-725™), usando la misma serie de tensioactivos.

Cada uno de estos polímeros son copolímeros de bloques de estireno y ácido maleico. Los promedios de peso molecular para SMA-2000™ y SMA-725™ son 6.000 Da y 130.000 Da, respectivamente.

[00230] Para examinar la relación entre el tamaño de partícula de polímero y el tamaño del agregado de tensioactivo en la formación de nanorretas, se ensayaron tensioactivos de cada uno de los tensioactivos de la serie Triton™ X y poligliceril-10-alquilo (PG). En primer lugar, se midió el diámetro agregado medio del tensioactivo mediante dispersión dinámica de la luz (Tabla 2). Para la serie de tensioactivos Triton™ X, cuanto mayor es el balance de lípidos hidrófobos (HLB) del tensioactivo, menor es el diámetro promedio del agregado ($D_{TX-45} > D_{TX-305} \approx D_{TX-100}$). Esto puede deberse al aumento del componente del grupo de cabeza hidrófilo del tensioactivo, que puede conducir a una mayor curvatura del agregado de tensioactivo y, por tanto, a un diámetro medido más pequeño del agregado. Para la serie PG de tensioactivos, los diámetros agregados medidos no se ajustan a esta tendencia, posiblemente debido a las diferentes longitudes y grados de saturación en las cadenas alquilo de los tensioactivos, que pueden alterar el empaquetamiento de monómeros y posiblemente la estructura del agregado.

Tabla 2. Caracterización Dinámica de la Dispersión de Luz de Agregados Promedio de Surfactante y Polímeros SMA Activados.
--

Tabla 2. Caracterización Dinámica de la Dispersión de Luz de Agregados Promedio de Surfactante y Polímeros SMA Activados.				
Surfactante Aditivo	Índice de Poli Dispersidad (PDI)	Diámetro Agregado Promedio (nm)	Equilibrio Lipídico Hidrofóbico	Carbones de Cadena Alquilo
0.5% Triton X-305™	0.162	9.913	17.3	12
0.5% Triton X-45™	0.467	90.7	9.8	12
0.5% Triton X-100™	0.246	5.327	13.5	12
0.5% PGL1	0.356	46.05	10.5	18
0.5% PGL 2	0.169	96.66	12	12
0.5% PGL 3	0.541	304.9	11	16
0.5% PGL 4	0.109	69.98	14	12
0.5% PGL 5	1	557	10.5	18
0.5% Oleato de sodio	NA	392	18	18
Polímero	PDI	Diámetro de Partícula Promedio (nm)	Longitud del Contorno	
0.5% SMA-2000™	0.945	4.305	14nm	
0.5% SMA-725™	0.418	10.73	349nm	

Ejemplo 2

[00231] El autoensamblaje de nanorredes puede estar impulsado por factores que incluyen el diámetro medio de partícula del polímero, el diámetro medio del agregado de tensioactivo y la relación (peso/peso) de polímero a tensioactivo en solución.

[00232] Aquí, el análisis de la formación de nanorred comenzó buscando determinar si cualquier combinación dada de tensioactivo y polímero conducía a la coprecipitación de tensioactivo y polímero en un complejo tras la acidificación de la solución (Fig. 2). Cada uno de los tensioactivos de las series PG y Triton™ son generalmente estables en solución ácida. Sin embargo, se

observa que la serie de tensioactivos PG puede degradarse lentamente en condiciones muy ácidas. Al combinar soluciones de un polímero SMA dado y tensioactivo de la serie PG o Triton™, e incluso cuando las partículas de polímero y los agregados de tensioactivo interactúan, prevalece una carga negativa general. Esa carga se puede neutralizar mediante protonación (mediante la adición de una fuente de protones, por ejemplo, ácido). Tras tal neutralización, se forma inmediatamente un precipitado voluminoso y comienza a flocular y sedimentar fuera de la solución. La formación de este precipitado se puede medir mediante cambios en la absorbancia de la solución a 540 nm, una medida de la turbidez de la solución. La velocidad y la cantidad de formación de turbidez en cualquier solución dada se toma como una medida de la formación de nanorred.

[00233] Triton X-100™, Triton X-305™ y Triton X-45™ mostraron coprecipitación de tensioactivo y polímero tras la adición de tensioactivo (figuras 2A, 2B y 2C, cuadrados). Una vez por encima de la relación 1:1 (peso/peso) de tensioactivo a polímero, la adición de un exceso de tensioactivo no aumentó significativamente la precipitación. Esto sugirió que una vez que el polímero está saturado, la adición de un exceso de tensioactivo no se incorpora a la composición de nanorred.

[00234] En el caso de Triton X-305™, el exceso de

tensioactivo (500 ppm) condujo a la resolubilización del precipitado de nanorred (Fig. 2A, cuadrados). Se observó una tendencia similar con Triton X-100™, pero fueron necesarias concentraciones mucho más altas (> 500 ppm) para provocar la solubilización del precipitado de nanorred (Fig. 2B, cuadrados). En el caso de Triton X-45™, el tensioactivo a altas concentraciones es turbio, lo que evita la diferenciación entre la precipitación de nanorred y los agregados de tensioactivo basal, por lo que no se detectó resolubilización.

[00235] En la proporción de 1:1 (peso:peso), el polímero SMA-2000™ fue capaz de formar nanorredes y coprecipitar con cualquiera de los tensioactivos de la serie Triton™ (figuras 2A, 2B y 2C, cuadrados). A continuación, para probar el efecto de la longitud del polímero sobre la formación de nanorred, se repitieron los experimentos con el polímero de mayor peso molecular SMA-725™. En contraste con SMA-2000™, SMA-725™ solo fue capaz de formar nanorredes con los agregados tensioactivos relativamente más grandes formados por Triton X-45™ (Fig. 2A, 2B y 2C, triángulos).

[00236] Estos experimentos se repitieron usando los mismos dos polímeros SMA pero con la serie PG de tensioactivos. En casi todos los casos, la serie PG de tensioactivos pudo coprecipitar con ambos polímeros, lo que

indica la formación de nanorredes. Estos resultados son consistentes con los grandes diámetros agregados de los tensioactivos PG registrados por la dispersión dinámica de la luz (Tabla 2). El diámetro agregado más pequeño del tensioactivo registrado fue de 46 nm para el poliglicerol-10-monoleato (PGL1), casi 4 veces mayor que el promedio medido diámetro de partícula del polímero solo partícula formada por SMA-725™ (10,7 nm, Tabla 2).

Ejemplo 3

[00237] La relación del tamaño de partícula promedio del polímero con el diámetro agregado promedio del tensioactivo es un factor significativo que impulsa la formación de nanorred.

[00238] Para entender por qué el tamaño de partícula promedio del polímero puede ser importante para la formación de nanorredes, se midieron los diámetros de partícula promedio de las partículas de polímero en una solución tamponada mediante dispersión de luz dinámica (Tabla 2). Aunque cada polímero es una cadena extendida que tiene una longitud de contorno (nm) en condiciones básicas, la formación de cadena extendida no existe necesariamente en otras condiciones de solución. Por ejemplo, en una solución tamponada a pH neutro, los polímeros adoptarán a menudo una estructura de partículas compacta que tiene un diámetro medio de partículas medible y calculable.

[00239] Por ejemplo, considere el SMA-2000[™] en las mediciones de dispersión de luz dinámica. Aunque el SMA-2000[™] tiene una longitud de contorno de 14 nm, el polímero formó una partícula compacta que tiene un diámetro medio de partícula de ≈ 4 nm (Tabla 2). Para SMA-725[™], el polímero formó una partícula que tenía un diámetro de partícula promedio de ≈ 10 nm a pesar de una longitud de contorno de casi 350 nm (Tabla 2).

[00240] Además, y también a partir de nuestros resultados de dispersión de luz dinámica, se observó que tanto el Triton X-100[™] como el Triton X-305[™] formaron agregados tensioactivos que tenían diámetros promedio de agregados por debajo de 10 nm (Tabla 2). Por el contrario, Triton X-45[™] formó un agregado que tenía un diámetro promedio de agregado de 90 nm (Tabla 2). A pesar de que los tres tensioactivos forman nanorredes con SMA-2000[™], solo Triton X-45[™] formó una nanorred con SMA-725[™] (Fig. 2C, triángulos).

[00241] A partir de estos resultados, si un tensioactivo tiene un diámetro de agregado medio mayor que el diámetro medio de partícula de un polímero, esa combinación de tensioactivo polimérico formará una nanorred. En consecuencia, como cada tensioactivo de la serie PG formaba un agregado que tenía un diámetro de agregado promedio de al menos 40 nm, tanto el SMA-725[™] como

el SMA-2000™ pudieron interactuar y formar nanorredes (Tabla 3).

Tabla 3. Formación de Nanorred con Tensioactivo de la Serie PGL y SMA-725™ y SMA-2000™				
Tensioactivo	Relación de Tensioactivo a Polímero (p/p)	Control	SMA-725™	SMA-2000™
		(Absorbancia a 540 nm)	(Absorbancia a 540 nm)	(Absorbancia a 540 nm)
PGL1	0	0.001	0.107	0.162
PGL1	0.5	0.022	0.192	0.272
PGL1	1	0.035	0.322	0.475
PGL1	1.5	0.053	0.453	0.981
PGL1	2	0.101	1.06	1.793
PGL1	5	0.195	2.333	2.245
PGL2	0	NA	0.11	0.14
PGL2	0.5	NA	0.124	0.272
PGL2	1	NA	0.141	0.22
PGL2	1.5	NA	0.14	0.223
PGL2	2	NA	0.184	0.253
PGL2	5	0.12	0.269	0.529
PGL2	10	0.562	2.063	2.249
PGL2	20	0.143	1.296	2.261
Triton X-305™	0	0	0.021	0.042
Triton X-305™	0.5	-0.001	0.051	0.031
Triton X-305™	1	-0.003	0.057	0.457
Triton X-305™	2	-0.005	0.062	0.512
Triton X-305™	5	-0.002	0.068	0.02
Triton X-100™	0	-0.006	0.024	0.042
Triton X-100™	0.5	-0.009	0.047	0.075
Triton X-100™	1	-0.006	0.073	0.163
Triton X-100™	2	-0.006	0.144	1.149
Triton X-100™	5	0.008	0.131	1.728
Triton X-100™	10	-0.006	0.003	1.54
Triton X-100™	20	0	0	0.903
Triton X-45™	0	-0.01	0.022	0.043
Triton X-45™	0.5	0.017	1.333	1.781
Triton X-45™	1	0.091	1.398	1.848
Triton X-45™	2	0.139	1.724	1.866
Triton X-45™	5	0.378	1.594	NA
Triton X-45™	10	0.978	NA	NA

Ejemplo 4Efecto de la longitud del polímero sobre el tamaño de la nanorred.

[00242] Para medir el tamaño de las nanorredes, utilizamos dispersión de luz dinámica. Las nanorredes generalmente tenían diámetros de nanorred más pequeños que el diámetro agregado promedio del tensioactivo (Tabla 4). Esto sugiere que el polímero pudo compactar o disociar parcialmente los agregados tensioactivos. Sin embargo, en algunos casos, la adición de los polímeros dio como resultado nanorredes que tenían diámetros de nanorred sin cambios en el tamaño, o incluso un diámetro de nanorred mayor en comparación con el diámetro promedio del agregado del agregado de tensioactivo solo, especialmente en los casos de PGL 2 y Triton X-45™ (Tabla 4). Curiosamente, estos dos polímeros a menudo formaban nanorredes de diferentes tamaños con los mismos tensioactivos. Los tensioactivos con pequeñas cadenas alquilo (PGL4 y PGL 2, NCH₂ = 12) formaron nanorredes con SMA-2000™ que eran de 2 a 4 veces más pequeñas que las formadas por SMA-725™ (Tabla 4). Sin embargo, y sorprendentemente, el polímero SMA-725™ de mayor longitud de contorno generalmente formó nanorredes con diámetros de nanorred más pequeños que los formados por SMA-2000™ cuando se emplearon tensioactivos con cadenas alquilo largas (carbonos de cadena alquilo > 12) (Tabla 2).

Este tamaño de nanorred más pequeño puede deberse a la disminución de los requisitos de energía libre de un solo polímero largo (SMA-725™) que estabiliza un agregado de tensioactivo en comparación con las contribuciones entrópicas más altas de múltiples polímeros más pequeños (SMA-200™) que estabilizan el mismo agregado de tensioactivo.

Tabla 4: Mediciones de Dispersión Dinámica de Luz Mezclas de Tensioactivos de Varios Polímeros					
Polímero	Tensioactivo	Índice de Poli Dispersidad (PDI)	Diámetro de Nanorred (nm)	Cambio de tamaño relativo al agregado de Tensioactivo*	Carbonos de Cadena alquilo
SMA-2000™	PGL1	0.471	23.54	-49%	18
SMA-725™	PGL 1	0.379	24.49	-48%	18
SMA-2000™	PGL2	0.269	95.38	1%	12
SMA-725™	PGL 2	0.188	178.4	85%	12
SMA-2000™	PGL 3	0.339	116.2	-62%	16
SMA-725™	PGL 3	0.511	24.32	-92%	16
SMA-2000™	PGL 4	0.52	8.074	-89%	12
SMA-725™	PGL 4	0.225	44.81	-36%	12
SMA-2000™	PGL 5	0.45	544.6	1%	18
SMA-725™	PGL 5	0.49	366.4	-35%	18
SMA-2000™	TX-100™	0.51	5.123	-4%	12
SMA-725™	TX-100™	ND	ND	NA	12
SMA-2000™	TX-305™	0.392	3.543	-62%	12
SMA-725™	TX-305™	ND	ND	NA	12
SMA-2000™	TX-45™	0.342	220.3	144%	12
SMA-725™	TX-45™	0.357	101.5	12%	12
SMA-2000™	Oleato de Na	0.426	53.24	-75%	18
SMA-725™	Oleato de Na	0.445	34.43	-91%	18

Ejemplo 5

[00243] Este ejemplo compara los tamaños de diámetro de partícula promedio del polímero con la estabilidad de una nanorred de ese polímero cuando el diámetro agregado

promedio del tensioactivo se mantiene constante. Se compararon las eficiencias de floculación (por ejemplo, la velocidad de formación) de las nanorredes de oleato de sodio formadas por SMA-2000™ y SMA-725™ (Fig. 3A). El oleato de sodio forma un gran agregado de tensioactivo que tiene un diámetro promedio de agregado de 392 nm (Tabla 2) y, por lo tanto, es compatible con SMA-2000™ y SMA-725™ para la formación de nanorred, el oleato de sodio tiene una cadena alquilo larga ($NCH_2 = 18$). El oleato de sodio libre en solución precipitará, pero se producirá poca floculación o sedimentación (Fig. 3B). Sin embargo, en nanorredes que contienen SMA-725™, tras la desestabilización por cambio de pH (Fig. 3C), la interacción entre el polímero que interactúa y el oleato de sodio se precipita y se agrega rápidamente. Esta agregación se produce rápidamente, lo que indica la desestabilización de la nanorred (Fig. 3C). Por el contrario, el polímero de cadena corta SMA-2000™ forma nanorredes a base de oleato de sodio que no floculan muy bien. Esto es evidente debido a la sedimentación comparativamente más lenta de las nanorredes precipitadas basadas en oleato de sodio SMA-2000™ (Fig. 3D). La floculación de nanorredes desestabilizadas se midió cuantitativamente observando el aclaramiento de la solución después de la desestabilización del polímero (Fig. 3E). Las mediciones cuantitativas de velocidad y calidad de

floculación, respectivamente, respaldaron las observaciones cualitativas de que las nanorredes de oleato de sodio formadas por un polímero más largo presentan una cinética de agregación más rápida y, por lo tanto, son más fáciles de eliminar físicamente cuando se utilizan para el tratamiento de aguas residuales (Fig. 3E).

Ejemplo 6

Adición de nanorredes para la captura de aceite y sólidos en suspensión del agua producida

[00244] En este ejemplo, se emplearon muestras de agua de retorno y muestras de agua producida con nanorredes. Las muestras de agua utilizadas procedían de las actividades típicas de producción de petróleo de la Formación Bakken. Se midió el contenido de hidrocarburos de las muestras de agua antes y después de la exposición a las nanorredes. Se añadieron nanorredes que comprendían SMA-2000™ y Triton X-100™ a las muestras de agua de retorno así como a las muestras de agua producida. Los sólidos de las mezclas resultantes se eliminaron luego por filtración. A continuación, se volvió a medir el contenido de hidrocarburos de cada filtrado recuperado de las muestras de agua tratadas.

[00245] Los resultados se muestran en la Tabla 5 a continuación.

Tabla 5: Contenido de Hidrocarburos del Reflujo y Agua Producida de la Formación Bakken Antes y Después del Tratamiento de Nanorred. (nanorredes 250 ppm, 10 micron filtración de 10 micrones, ppb=partes por mil millones)				
	Agua de Retorno (ppb)		Agua Producida (ppb)	
	ADICIÓN PRE NANORRED	RETIRO POSTPRECIPITADO	ADICIÓN PRE NANORRED	RETIRO POSTPRECIPITADO
Hidrocarburos de Petróleo Extraíbles (C ₁₀ -C ₁₉)	378,000	11,500	9,410	1,180
Hidrocarburos de Petróleo Extraíbles (C ₁₉ -C ₃₂)	276,000	11,000	8,640	1,450
Hidrocarburos agregados * (6-10)	1,020,000	1,430	4,44	ND

Ejemplo 7

Optimización de nanorredes para la remediación selectiva de hierro a partir del agua producida (nanorredes como plataforma para la eliminación selectiva de contaminantes)

[00246] Se seleccionaron varios tensioactivos diferentes para identificar un tensioactivo adecuado con el que preparar una nanorred selectiva de hierro. Además, se ensayó una partícula de lípido SMA (lecitina). En un procedimiento de cribado, se identifica la nanorred selectiva de hierro que puede capturar de forma selectiva el hierro del agua producida por operaciones de gas y petróleo no convencionales. Una vez que se identifica el tensioactivo, la formulación de nanorred puede refinarse más para eliminarla fácilmente mediante flotación por aire disuelto y/o filtración.

[00247] Cada uno de los oleatos de sodio, CAPB™, (COCAMIDOPROPYL BETAINE), PGL1, PGL2, PGL3, PGL4, PGLW y

cocoilglicinato, se formaron en nanorredes utilizando el polímero SMA-2000™ con una relación de 5:1 peso/peso. (tensioactivo:polímero). También se ensayó una formulación de lípido-SMA (lecitina y SMA-2000™). Las nanorredes se agregaron a soluciones que comprenden hierro disuelto en tres concentraciones diferentes de cationes divalentes (4000 ppm, 400 ppm y 40 ppm). También se probaron un primer control sin nanorred añadida y un segundo control con KOH añadido. Se llevaron a cabo dos experimentos separados. En el primero, las soluciones con nanorredes o SMA-lecitina añadidas se dejaron durante la noche y luego se filtraron. En el segundo, las soluciones con nanorredes y SMA-lecitina añadidas se dejaron durante 10 minutos y luego se filtraron. Los controles también se filtraron una vez transcurrido el tiempo requerido.

[00248] El oleato de sodio y el monoestearato de poligliceril-10 (PGL5) mostraron buenas propiedades de direccionamiento para la captura de hierro en nanorredes basadas en SMA-2000™. PGL5 (PGLW) muestra una eliminación más consistente en el rango de concentraciones de calcio. Por el contrario, los resultados cuando se toman en conjunto en todos los tensioactivos probados tienden a mostrar una eliminación relativamente mejor a 400 ppm de calcio y relativamente peor a 4000 ppm. La serie de tensioactivos PGL parece ser generalmente insensible a la

concentración de calcio. Los tensioactivos con alta afinidad de unión por el hierro (por ejemplo, cocoilglicinato) parecen verse más afectados negativamente por la concentración de iones calcio. Los resultados se muestran gráficamente en las Figuras 4 y 5.

Ejemplo 8

[00249] Se prepararon catorce (14) nanorredes diferentes. Cada nanorred comprendía SMA-2000™ o SMA-725™ y uno de los siguientes tensioactivos: oleato de sodio, PGL2, PGL3, cocoilglicinato. También se probó una formulación de SMA-lecitina. A continuación, se añadió cada una de las nanorredes a diversas soluciones que comprendían concentraciones variables de iones Fe^{2+} y Ca^{2+} . En un primer experimento, las soluciones tratadas se dejaron durante 10 minutos. En un segundo experimento, las soluciones tratadas se dejaron durante 12 horas. Los resultados indican que las nanorredes SMA-2000™ parecen relativamente mejores para eliminar el hierro que las nanorredes SMA-725™. Las concentraciones crecientes de cationes divalentes como el calcio parecen disminuir en general la capacidad de unión de hierro de las nanorredes. También se probó un control sin nanorredes y tratado solo con KOH. Los resultados se muestran gráficamente en la Figura 6.

Ejemplo 9

[00250] Se prepararon cuatro (4) nanorredes

utilizando SMA-725™ como polímero y utilizando uno de los siguientes tensioactivos: PGL2, PGLW, oleato de sodio y glicinato de cocoilo. También se probó un control de SMA-lecitina. Se prepararon soluciones que comprenden iones de hierro en una proporción de 75:25 Fe^{3+} : Fe^{2+} , a una concentración de 100 ppm. A continuación, se añadió una de cada una de las cuatro nanorredes y la formulación de SMA-lecitina a una solución de hierro separada y se dejó reposar durante 10 minutos o 12 horas. También se probó un control sin nanorredes y tratado solo con KOH. Los resultados, representados gráficamente en la Figura 7, muestran generalmente que el aumento del tiempo de residencia de la solución de hierro tratada con nanorredes aumenta generalmente la cantidad de hierro eliminado.

Ejemplo 10

[00251] Se prepararon seis nanorredes diferentes utilizando oleato de sodio como tensioactivo y tres polímeros diferentes. Cada polímero se usó para preparar dos nanorredes, la primera de las cuales comprendía una relación de 1:5 peso/peso de tensioactivo polimérico y la segunda comprendía una relación de 1:1 peso/peso. Los resultados se muestran gráficamente en la Figura 8. La figura muestra en general que el aumento de la concentración de tensioactivo dentro de una nanorred aumenta la eliminación de hierro. Esto sugiere que la

eliminación de hierro depende, al menos en parte, de la concentración de tensioactivo dentro de la nanorred y no depende únicamente del pH de una mezcla de nanorred.

Ejemplo 11

[00252] Se prepararon nanorredes que comprendían SMA-725™ y uno de los siguientes tensioactivos: PGL5, cocoil glicinato u oleato de sodio y una formulación de lecitina SMA y cada una se añadió a una muestra separada de agua producida. El agua producida comprendía 500 ppm de aceite, >100,000 ppm, sólidos disueltos totales (TDS) y >10,000 ppm de cationes divalentes. También se probaron un primer control sin nanorred y un segundo control sin nanorredes y tratado solo con KOH. Los resultados se muestran en las Figuras 9 y 10. Generalmente, los resultados indican que las nanorredes a base de oleato de sodio proporcionan una combinación relativamente mejor de eliminación de aceite y eliminación de hierro en muestras de agua producidas reales.

Ejemplo 12

Las nanorredes de oleato de sodio se pueden ajustar mediante una pequeña adición de monoestearato de poliglicerilo 10 para mejorar la flotación (nanorred opgw)

[00253] Se preparó una nanorred OPGW compuesta por SMA-725™, un 75% de oleato de sodio, un 25% de monoestearato de poligliceril-10, polimerotensioactivo de

relación 1:1 en peso. A continuación, se añadieron las nanorredeas a muestras de agua producidas que tenían niveles variables de cationes divalentes elevados (10 ppm de hierro, 50 ppm de hierro y 100 ppm de hierro) y se dejaron durante 10 min. Luego se filtraron las muestras y se analizaron el contenido de hierro (Figura 11A), el color (Figura 11B) y la turbidez (Figura 11C) del filtrado de las muestras de agua tratada. También se probaron un primer control sin nanorredeas añadida y un segundo control sin nanorredeas y tratado solo con KOH. Los resultados generalmente indican que la nanorred OPGW proporciona una rápida eliminación tanto de hierro como de petróleo y gas de las muestras de agua producidas y en presencia de cationes divalentes elevados.

Ejemplo 13

Las nanorredeas opgw mejoran la eliminación basada en la flotación de aire disuelto (daf) de hierro e hidrocarburos del agua producida.

[00254] La nanorred OPGW se preparó como se indica anteriormente y se añadió a las muestras de agua producidas que luego se trataron mediante flotación por aire disuelto (DAF), seguido de filtración. Antes de la adición de nanorredeas y nuevamente después de la filtración, las muestras se analizaron para determinar el contenido de hierro, el color y la turbidez. También se probó un control

sin nanorred añadida. La concentración de hierro total del filtrado de las muestras de agua tratadas se determinó mediante el método Ferrozine. Un color amarillo es indicativo de hidrocarburos disueltos y el hierro coloidal se midió mediante absorbancia a 350 nm. La turbidez se midió mediante absorbancia a 540 nm. Los resultados se muestran gráficamente en la Figura 12.

Ejemplo 14

[00255] Tratamiento de agua producida con nanorredes OPGW (SMA-725™, un 75% de oleato de sodio, un 25% de poligliceril-10 monoestearato, polímero tensioactivo de relación 1:1), un primer control con agua producida sin tratar y un segundo control sin nanorredes y solo la filtración se probó para la concentración de metales y para los hidrocarburos de petróleo extraíbles. Todas las muestras se mezclaron vigorosamente con la adición de aire durante 10 minutos. Los resultados se muestran en la Figura 13.

[00256] En los siguientes Ejemplos 15-21, se usaron los siguientes métodos, reactivos y materiales.

Ejemplos de reactivos y materiales 15-21:

[00257] El polímero de poli(estireno-co-anhídrido maleico) se adquirió de Jiaxing Huawen Chemical Co™, Ltd (SMA-725™, lote n° S190405A01) o Cray Valley™ (SMA-2021™, lote n° 204222A; SMA-2000™, lote n° PS16072901 y SMA-3000™,

lote n° PS16111302). Los polímeros SMA-725™ y SMA-2021™ se trituraron hasta obtener un polvo fino antes de su uso. Se adquirió poli(ácido diisobutileno-a/f-maleico) (DIBMA™, lote n° 4217473) de Anatrache, mientras que los polímeros poli(estireno-co-anhídrido maleico), terminados en cumeno (terminado en SMA-cumeno, lote n° 08728HN) y poli(estireno-co-anhídrido maleico), éster isobutílico parcial (SMA-IBE, lote n° 09918JN) se adquirieron de Sigma Aldrich.

[00258] Tensioactivos no iónicos 4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil-polietilenglicol Triton™ X-100, lote n° SLBX5574; Triton™ X-305 (70% en H₂O), Lote n° SLBX0207; Triton™ X-45, Lote n° SLBX0207; CAS n° 9002-93-1), laurato de sorbitán (Span 20™; CAS n° 1338-39-2, Lote n° MKCF5665), monolaurato de polietilenglicol sorbitán (Tween 20™; CAS n° 9005-64-5, Lote n° SLBW9887) monopalmitato de polietilenglicol sorbitán (Tween 40™; CAS n° 9005-66-7, Lote n° MKBV6853V), monoestearato de polietilenglicol sorbitán (Tween 60™; CAS n° 9005-67-8, Lote n° MKBX0810V), Triestearato de polioxietilensorbitán (Tween 65™; CAS n° 9005-71-1, Lote n° MKCG4378), monooleato de polietilenglicol sorbitán (Tween 80™; CAS n° 9005-65-6, Lote n° BCBV5152) y polietilenglicol sorbitán trioleato (Tween 85™; CAS n° 9005-70-3, Lote n° MKCG2988), sal sódica del ácido (Z)-9-octadecenoico (oleato de sodio™; CAS n° 143-19-1, n° de lote SZBG1110V), sal sódica del ácido p-

toluensulfínico hidratada (p-toluenosulfinato sódico hidrato™; CAS n° 207801-20-5, Lote n° MKCD1005), sal sódica monohidrato del ácido 1-octanosulfónico (1-octanosulfonato sódico monohidrato™; CAS n° 207596-29-0, Lote n° BCBW1986), 9,10-dihidro-9,10-dioxo-2-antracenesu sal sódica del ácido fónico monohidrato (sal sódica del ácido antraquionona-2-sulfónico monohidrato™; CAS n° 153277-35-1, Lote n° MKCD1028), sal de potasio del ácido o-etilxántico (potasio etil xantogenato™; CAS n° 140-89-6, Lote n° 44706), sal sódica del ácido dodecilbencenosulfónico (dodecilbencenosulfonato de sodio™, CAS n° 25155-30-0, Lote n° STBH2778) y 1,2-hexanodiol (CAS n° 6920-22-5, Lote n° STBH6345) se adquirieron de Sigma Aldrich.

[00259] El poli(oxi-1,2-etanodiol)-alfa-isotridecil-omega-hidroxifosfato (Lakeland PAE 136™, CAS n° 73038-25-2, Lote n° W475) se adquirió de Lakeland Labs, Ltd. El ácido (Z)-9-octadecenoico (ácido oleico™, CAS n° 112-80-0, Lote n° SJ1-111) se adquirió de Vantage. El polietilenglicol monoalquil éter (Genapol X-080™, CAS n° 9043-30-5) se adquirió de Fluka, mientras que la lauramidopropil betaína (TC-LAB 35™, CAS n° 86438-78-0) y el cocoil glicinato de potasio (Amin GCK 30H™, CAS n° 301341-58-2) se adquirieron de Tinci. Se adquirió 1-dodecanosulfonato de sodio (sal sódica del ácido dodecano-1-sulfónico™, CAS n° 2386-53-0, Lote n° K49293246 806) de Merck KGaA. El

alquilpoliglucósido (Glucósido de Coco™, CAS n° 141464-42-8, Lote n° 16072-A52) se adquirió en New Directions. El Monoestearato de decaglicerilo (poliglicerol-10-estearato™, CAS n° 79777-30-3), monolaurato de decaglicerilo (poliglicerol-10-laurato™, CAS n° 34406-66-1), (poliglicerol-10-palmitato™), y el monooleato de triglicerilo (polyglycerol-10-oleate™, CAS n° 11094-60-3) se obtuvo de Shandong Binzhou GIN&ING New Material Technology Co., Ltd. El bencenosulfonato de sodio (C10-16) (Bio Soft D-40™, CAS n° 68081-81-2, Lote n° 8252764), olefina sulfonato de sodio (C14-16) (Bio Terge AS-40™, CAS n° 68439-57-6, Lote n° 8242348), lauril sulfoacetato de sodio (Lattanol LAL Powder™, CAS n° 1847-58-1, Lote n° 8170061), lauroil lactilato de sodio (Stepan SLL FB™, CAS n° 13557-75-0, Lote n° 8086194), lactato de lauril lactilo (Stepan Mild L3™, CAS n° 910661-93-7, Lote n° 8080185), ácido alquilbencenosulfónico (C11-13) (Stepan Sulfonic 100™, CAS n° 68608-88-8, Lote n° TK-265), tridecil éter sulfato de sodio (Cedepal TD-403 MFLD™, CAS n° 25446-78-0, Lote n° 7606923), cocoanfodipropionato disódico (Amphosol 2CSF™, CAS n° 68604-71-7, Lote n° S77072810), y ácido isopropilamina alquilbencenosulfónico (C9-17 Br) (Ninate 411™, CAS n° 68649-00-3, Lote n° 8082275) se adquirieron de Stepan Company. El ácido graso de soja destilado VDISTILL DV53™ (CAS n° 68308-53-2, Lote n° 829608) y el ácido graso

de canola destilado VDISTILL DV 63TM (Lote n° 833603) se adquirieron en Vantage, n-Decil- β -D-tiomaltósido (β -decil- β -D-tiomaltopiranosidoTM, CAS n° 148565-56-4, Lote n° 4216901), 1H, 1H, 2H-perfluorooctil- β -D-maltopiranosido (octil maltósido, fluoradoTM CAS n° 118680-70-9, Lote n° 4217259), n-dodecil- β -D-tiomaltósido (β -dodecil- β -D-tiomaltopiranosidoTM, CAS n° 148565-58-6, Lote n° 4216186), 1, 2, 5, 6-tetradecil- β -D-glucopiranosido-3, 4-O-di-dodecil-D-manitol (perGlu-bisdodecil manitolTM, Lote n° 4217252, 1, 2, 5, 6-tetradecil- β -D-glucopiranosido-3, 4-O-di-tridecil-d-manitol (perGlu-bistridecyl mannitolTM, lote n° 4217317), 1, 2, 5, 6-tetradecil- β -D-glucopiranosido-3, 4-O-Di-tetradecil-d-manitol (pergLu-bistetradecyl mannitolTM, Lote n° 4217150), 3, 6, 9, 12, 15, 18, 21, 24-octaoxahexatriacontan-1-ol (octaetilenglicol monododecil éterTM, CAS n° 3055-98-9, Lote n° 4217388), n-decil- β -D-tioglucofósido (n-decil- β -D-tioglucopiranosidoTM, CAS n° 98854-16-1, Lote n° 127098), n-nonil- β -D-tioglucofósido (n-nonil- β -D-tioglucopiranosidoTM, CAS n° 98854-15-0, Lote n° 4216868), hexaetilenglicol monodecil éter (decil hexaetilenglicol éterTM, CAS n° 5168-89-0, Lote n° 4157194), n-heptil- β -D-tioglucofósido (β -heptil- β -D-tioglucopiranosidoTM, CAS n° 85618-20-8, Lote n° 4216927), β -octil- β -D-tiomaltósido (β -octil- β -D-tiomaltopiranosidoTM, CAS n° 148616-91-5, Lote n° 4216064), decil hexaetilenglicol éter (hexaetilenglicol monoctil

éter™, CAS n° 4440-54-4, Lote n° 4216205), hexaetilenglicol monododecil éter (dodecil hexaetilenglicol éter, CAS n° 3055-96-7, Lote n° 4215962) y dodecil heptaetilenglicol éter (heptaetilenglicol monododecil éter™, CAS n° 3055-97-8, Lote n° 4216865) se adquirieron de Anatrace.

[00260] N-octanoil-L-metionina (CAS n° 35440-75-6), n-decanoil-L-metionina (CAS n° 51570-51-5), n-dodecanoil-L-metionina (CAS n° 35440-74-5), n-octanoil-L-treonina (CAS n° 91694-75-6), n-decanoil-L-treonina (CAS n° 30664-76-7), n-dodecanoil-L-treonina (CAS n° 14379-57-8) y n-dodecanoil-L-histidina (CAS n° 55258-11-2) fueron sintetizados por GreenCentre Canada.

[00261] Los siguientes tensioactivos de Anatrace se pueden abreviar como sigue: n-decil- β -D-tiomaltopiranosido como nDDTP-D335, octil maltósido, fluorado como PFDMP-O310F, β -dodecil- β -D-tiomaltopiranosido como nDDTP-D342, perGlu-bisdodecil manitol como DDDM-MNA-C₁₂, perGlu-bistridecil manitol como pGBTM-MNA-C₁₃, perGlu-bistetradecil manitol como pGBTEM-MNA-C₁₄, octaetilenglicol monododecil éter como OEGMDE-D- O330 tioglucopiranosido como nDDTGP-D323, n-nonil- β -D-tioglucopiranosido como nNDTP-N335, éter monoocílico de hexaetilenglicol como HEGMOE-H350, n-heptil- β -D-tioglucopiranosido como nHDTP-H301, n-octil-tiomaltopiranosido como nODTTP-O320, hexaetilenglicol monodecil éter como HEGMDE-H360,

heptaetilenglicol monododecil éter como HEGMDDE-H370, hexaetilenglicol monododecil éter como HXEGMDDE-H375.

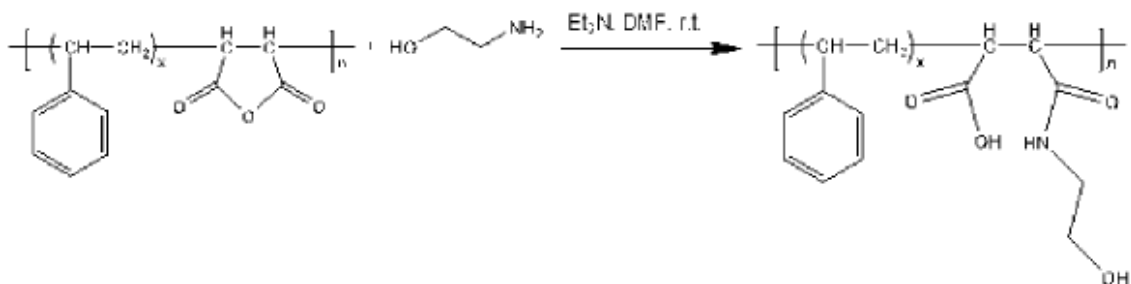
Hidrólisis de polímeros:

[00262] Primero se molieron SMA-725TM (Jiaxing Huawen Chemical Co.TM) y SMA-2021TM (Cray ValleyTM) hasta obtener un polvo fino, mientras que SMA-2000TM (Cray ValleyTM), SMA-3000TM (Cray ValleyTM), DIBMA (AnatraceTM), SMA-cumene terminado (Sigma AldrichTM) y SMA-IBE (Sigma AldrichTM) se adquirieron en forma de polvo.

[00263] En un matraz de fondo redondo de 3 bocas conectado con un condensador se añadió una solución de hidróxido de potasio (KOH) 500 mM en agua desionizada y se calentó a 50°C. A la solución de KOH caliente se le añadió un 5% (peso/vol) de SMA-XTM (X = SMA-725TM, SMA-2000TM, SMA-3000TM, SMA-2021TM, terminado en cumeno, IBE) y la mezcla de reacción se calentó a reflujo a 100 °C durante 3 h. Durante el reflujo, el polímero se disolvió completamente y para la reacción con SMA-725TM y SMA-2021TM se obtuvo una solución de color amarillo claro. La mezcla de reacción se enfrió a temperatura ambiente y posteriormente se filtró para eliminar las partículas no hidrolizadas. El filtrado se precipitó mediante la adición gota a gota de HCl 12 M con agitación hasta que se alcanzó un pH ≤ 2 . El precipitado se filtró usando un filtro de 10 μ m, se lavó 3 veces con 100 ml de solución diluida de HCl 50 mM y 3 veces con 100 ml de

agua desionizada. El polímero incoloro aislado se secó a temperatura ambiente durante 2 horas y se liofilizó durante la noche durante aprox. 12 horas.

Preparación de sma-2000™ derivatizado



Esquema 1. Reacción de sma-2000™ con etanolamina.

[00264] En un recipiente de reacción con una barra de agitación magnética, se disolvieron 0,200 g de polvo de SMA-2000™ en 10 ml de dimetilformamida para dar una solución amarilla clara. A esta mezcla de reacción se le añadieron 20 µL de trietilamina y 99 µL de etanolamina. Se observó un cambio de color de amarillo a una solución incolora. La mezcla de reacción se agitó durante 24 a temperatura ambiente. Tras la adición de 51 ml de solución acuosa ácida se obtuvo una suspensión incolora y se decantó el sobrenadante. Al precipitado incoloro se le añadieron 2 ml de tetrahidrofurano y el precipitado se disolvió durante la noche y se dejó evaporar durante dos días. Rendimiento: 0.234g. FTIR (ATR, cm^{-1}): 3380, 3027, 2930, 2887, 1769, 1717, 1653, 1596, 1492, 1452, 1387, 1176, 1061, 1033, 916, 760, 699.

Espectroscopia infrarroja

[00265] Se realizó espectroscopía de radiación de transformada de Fourier en polímeros de poli (estireno-co-anhídrido maleico) y polímeros de poli (estireno-co-ácido maleico) disponibles comercialmente usando un espectrómetro Agilent Technologies Cary 630. Equipado con un ATR de diamante (reflectancia total atenuada). Los espectros se registraron en el rango de 400-4000 cm^{-1} con un promedio de 4 exploraciones y una resolución de 1 cm^{-1} . Los modos de estiramiento por vibración de anhídrido maleico C=O se observaron a 1775 cm^{-1} y 1855 cm^{-1} , mientras que el modo de estiramiento de ácido maleico C=O se detectó a 1705 cm^{-1} (ver Killian et al. Chemistry and Physics of Lipids (2019), 218, 85-90).

Preparación de una solución madre de polímero al 2%:

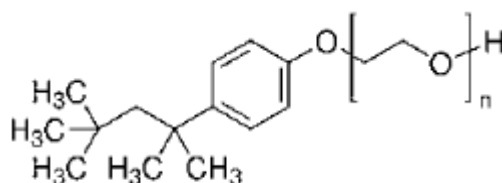
[00266] Se suspendieron 200 mg de polímero anhidro en agua desionizada y se ajustó el pH a 7-8 mediante la adición gota a gota de una solución de hidróxido de potasio 500 mM. Las soluciones de polímero se sonicaron para obtener una solución homogénea y se ajustaron a un volumen final de 10 ml. Las soluciones de polímero se filtraron usando un filtro de nailon de 0,22 μm .

Preparación de una solución madre de tensioactivo al 1%:

[00267] Se disolvieron 150 mg de tensioactivo en 15 ml de agua desionizada para formar soluciones madre

separadas al 1% de cada tensioactivo. Los siguientes tensioactivos N-octanoil-L-metionina, N-dodecanoil-L-metionina, N-decanoil-L-treonina, N-dodecanoil-L-treonina y N-dodecanoil-L-histidina se disolvieron en agua desionizada y el pH se ajustó a 8 para asegurar la completa disolución de los tensioactivos. Las soluciones de tensioactivo se filtraron usando un filtro de nailon de 0,22 μm .

[00268] La estructura química del tensioactivo modelo Triton™ serie X es la siguiente en la fórmula (i):



Formula (i)

Triton™ X-100 con $n=9-10$; Triton™ X-305 con $n=30$; Triton™ X-45 con $n=5$.

Dimensionamiento de partículas en dls:

[00269] El tamaño de las partículas con valores de intensidad se midió mediante dispersión de luz dinámica en un instrumento Malvern Modelo ZEN1600 NanoSizer-S™ (Malvern Instruments Inc, Westborough, MA, EE.UU.) a 25 °C con un ángulo de dispersión de 173°. Los valores numéricos de intensidad para las muestras de polímero hidrolizado y tensioactivo se obtuvieron utilizando un Malvern Zetasizer Nano ZS™ a 25 °C con un ángulo de dispersión de 173°.

[00270] Se prepararon soluciones de tensioactivo y

soluciones de polímero hidrolizado en solución tampón de Tris-HCl {Tris(hidroximetil)aminometano} pH=7 20 mM a temperatura ambiente y se diluyeron en tampón de Tris-HCl en concentraciones que varían del 1% al 0,1%. Las muestras se filtraron usando un filtro de nailon de 0,22 μM o de nailon de 0,45 μM , seguido inmediatamente por el tamaño en cubetas desechables. Las soluciones se diluyeron para obtener un índice de dispersión óptimo ($<0,5$) para las mediciones del diámetro del agregado de tensioactivo y del diámetro de las partículas de polímero. Se preparó el tensioactivo nDDTGP-D323 en TRIS 20 mM pH 7 y metanol (relación 1:1). En un caso, los valores de intensidad se tomaron como agregado de tensioactivo o diámetro de partículas de polímero. En otro caso, los valores numéricos se tomaron como agregado de tensioactivo o diámetro de partícula de polímero.

Tabla 6. Caracterización de la Dispersión Dinámica de la Luz Utilizando Valores de Intensidad de Agregados de Tensioactivos Aniónicos					
Tensioactivo	Longitud de la Cadena Alquilo	Grupo Principal	Concentración	Diámetro agregado [nm] (Intensidad Media d)	Índice de Poli Dispersidad (PDI)
Sulfonato de Sodio de 1 Octano	8	Sulfonato	10%	1.562	0.367
AminGCK 30H	18, 8	Glicinato de Acilo	2%	7.286	0.3
Antraquinona-2-sulfónico monohidrato, sodio	0	Sulfonato	1%	1.008	0.343
Stepan Bio Soft D-40™	0	Sulfonato	1%	5.13	0.322
Stepan Bio Terge AS-40™	14	Sulfonato	0.50%	6.434	0.181

Tabla 6. Caracterización de la Dispersión Dinámica de la Luz Utilizando Valores de Intensidad de Agregados de Tensioactivos Aniónicos					
Tensioactivo	Longitud de la Cadena Alquilo	Grupo Principal	Concentración	Diámetro agregado [nm] (Intensidad Media d)	Índice de Poli Dispersidad (PDI)
Cedepal TD-403 MFLD™	13	Éter sulfato	0.50%	6.421	0.235
Ácido dodeca ne-1- sulfónico	12	Sulfonato	0.50%	5.108	0.227
Lakeland PAE 136	13	Éster de Fosfato	0.25%	7.924	0.161
Lathanol LAL™	12	Sulfoacetato	1%	6.814	0.151
n-Decanoil-L-Metionina	10	Aminoácido	1%	85.47	0.172
n-Decanoil-L-Treonina	10	Aminoácido	0.50%	90.68	0.213
n-Dodecanoil-L-Metionina	12	Aminoácido	1%	2.32	0.138
n-Dodecanoil-L-Histidina	12	Aminoácido	1%	99.96	0.249
n-Dodecanoil-L-Treonina	12	Aminoácido	0.50%	99.77	0.203
n-Octanoil-L-Metionina	8	Aminoácido	1%	116.6	0.239
n-Octanoil-L-Treonina	8	Aminoácido	1%	119	0.372
Dodecylbencenosulfonato de Sodio	12	Sulfonato	2%	4.235	0.53
Ninate 411™	12	Sulfonato	0.50%	216.2	0.288
Ácido p-Toluenosulfónico	1	Sulfonato	10%	0.8236	0.32
Xantogenato de Etilo de Potasio	2	Xantogenato	10%	190.7	0.281
1- Pentasulfonato de Sodio	5	Sulfonato	0.25	0.8036	0.573
Stepan Mild L3™	12	Lactilato	1%	372.9	0.067
Stepan SLL FB™	12	Lactilato	0.10%	136.3	0.144
Stepan Sulfonic Acid™	2	Sulfonato	2%	2.821	0.186

Tabla 7. Caracterización Dinámica de la Dispersión de Luz Utilizando Valores de Intensidad de Agregados de Tensioactivos no Iónicos

Tensioactivo	Longitud de la Cadena Alquilo	Grupo Principal	HLB	Concentración	CMC [mM]	Diámetro Agregado [nm]	Índice de Poli Dispersidad (PDI)
Apo 10	10	Óxido de fosfina	NA	0.50%	NA	5.835	0.259
Apo 12	12	Óxido de fosfina	NA	0.50%	NA	82.41	0.272
Glucósido de coco	18	Glucopiranosido	13.1	2%	NA	27.32	0.154
Fluoro octil maltósido O310F	8	Azúcar maltósido	NA	0.50%	NA	23.83	0.172
Genapol X-80	13	Polietilenglicol	12	0.10%	0,06-0.15	10.58	0.147
HEGDMDE H370	12	Etilenglicol	NA	1%	0.069	8.218	0.14
HEGMDE H360	10	Etilenglicol	NA	0.50%	0.9	6.033	0.158
HEGMDE H350	8	Etilenglicol	NA	2%	10	5.505	0.25
HEGMDDE H375	12	Etilenglicol	NA	1%	NA	9.351	0.079
MNA C12	12	Glucopiranosido	NA	0.50%	0.004	6.122	0.068
MNA C13	13	Glucopiranosido	NA	0.50%	0.002	6.423	0.046
MNA C14	14	Manitol	NA	0.50%	0.001	7.548	0.217
nDDTP D342	12	Tiomaltopiranosido	NA	0.50%	0.05	11.67	0.131
nDDTGP D323	10	Tiomaltopiranosido	NA	1%	0.9	262.2	0.176
nDDTP D335	10	Tiomaltopiranosido	NA	0.50%	0.9	6.881	0.078
nDDTP H301	7	Tiomaltopiranosido	NA	3%	29	8.935	0.011
nDDTP N335	9	Tiomaltopiranosido	NA	0.50%	2.9	137	0.357
nODTTP O320	8	Tiomaltopiranosido	NA	2%	8.5	6.022	0.324
OEGMDE O330	12	Etilenglicol	NA	0.50%	0.09	8.099	0.165

Poliglicerol-10-Laurato	12	Éster de ácido graso de poliglicerol	12	1%	NA	114.8	0.226
Poliglicerol-10-Oleato	18	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	0.50%	NA	358	0.254
Poliglicerol-10-Palmitato	16	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	0.50%	NA	111.8	0.226
Poliglicerol-10-Estearato	18	Éster de ácido graso de poliglicerol	11	0.50%	NA	112.3	0.172
Span 20 TM	12	Sorbitan	8.6	0.10%	NA	1061	0.472
Triton X-100 TM	8	Etilenglicol	14.3	0.50%	0.24	10.07	0.089
Triton X-305 TM	8	Etilenglicol	17.3	0.50%	0.65	10.66	0.181
Triton X-45 TM	8	Etilenglicol	9.8	0.10%	0.1	156.3	0.325
Tween 20 TM	12	Polisorbato	16.7	0.50%	0.05	9.173	0.072
Tween 40 TM	16	Polisorbato	15.6	0.50%	NA	9.691	0.079
Tween 60 TM	18	Polisorbato	14.9	0.10%	0.022	134.2	0.637
Tween 65 TM	18	Polisorbato	10.5	0.50%	NA	114.5	0.286
Tween 80 TM	18	Polisorbato	15	0.50%	0.012	10.42	0.026
Tween 85 TM	16	Polisorbato	11	0.50%	NA	189.8	0.252

Tabla 8. Caracterización de la Dispersión Dinámica de La luz Utilizando Valores de Intensidad y Número de Agregados Poliméricos Hidrolizados

Polímero	Diámetro Agregado Calculado [nm]	Concentración	Diámetro Agregado Medido [nm] (Intensidad Media d)	Índice de Poli Dispersidad (PDI)	Concentración	Diámetro Agregado [nm] (Número Medio d)	Índice de Poli Dispersidad (PDI)
----------	----------------------------------	---------------	--	----------------------------------	---------------	---	----------------------------------

Tabla 8. Caracterización de la Dispersión Dinámica de La luz Utilizando Valores de Intensidad y Número de Agregados Poliméricos Hidrolizados

Polímero	Diámetro Agregado Calculado [nm]	Concentración	Diámetro Agregado Medido [nm] (Intensidad Media d)	Índice de Poli Dispersidad (PDI)	Concentración	Diámetro Agregado [nm] (Número Medio d)	Índice de Poli Dispersidad (PDI)
SMA-2001™	3.7	0.25%	6.627	0.274	0.10%	8.383	0.169
SMA-3000™	2.8	0.25%	3.713	0.213	0.01%	4.68	0.355
SMA-725™	6.8	0.10%	15.03	0.219	0.10%	10.16	0.283
SMA-cumene terminated	1.5	0.10%	7.123	0.164	0.50%	3.325	0.297
SMA-IBE	5.4	0.25%	9.759	0.209	0.01%	4.256	0.869
DIBMA	3.2	0.50%	76.74*	0.135	0.10%	5.704	0.271

* Muestra de DIBMA en Tris 20 mM pH = 14. Peso molecular DIBMA 10.000-12.000 g/mol

Tabla 9. Caracterización de la Dispersión Dinámica de la Luz de Agregados de Nanorred con Tensioactivos no Iónicos

Tensioactivo	Diámetro del Agregado de Tensioactivo [nm] (Intensidad Media d)	Polímero	Diámetro del Agregado de Polímero [nm]	Diámetro del Agregado de Polímero Calculado [nm]	Diámetro Agregado de Nanorred [nm]	Concentración	Índice de Poli Dispersidad (PDI)
Apo 10	5.835	DIBMA	92.7	3.2	69.11	0.005	0.178
Apo 12	82.41	DIBMA	92.7	3.2	57.88	0.005	0.446
Coco Glucosida	27.32	DIBMA	92.7	3.2	84.87	0.005	0.245
Genapol X 080	10.58	DIBMA	92.7	3.2	91.23	0.005	0.252
HEGMDDE H370	8.218	DIBMA	92.7	3.2	29.05	0.005	0.528
HEGMDE H360	6.033	DIBMA	92.7	3.2	110.2	0.005	0.351
HXEGMDDE H375	9.351	DIBMA	92.7	3.2	62.11	0.005	0.268
DDDM- MNA-C ₁₂	6.122	DIBMA	92.7	3.2	84.44	0.005	0.407

pGBTM- MNA-C ₁₃	6.423	DIBMA	92.7	3.2	126.4	0.005	0.578
pGBTEM- MNA-C ₁₄	7.548	DIBMA	92.7	3.2	89.21	0.005	0.597
nDDDTp D342	11.67	DIBMA	92.7	3.2	96.78	0.005	0.305
nDDTGP D323	262.2	DIBMA	92.7	3.2	93.11	0.005	0.234
OEGMDE 0330	8.099	DIBMA	92.7	3.2	79.04	0.005	0.175
Poliglicerol-10- monolaurato	114.8	DIBMA	92.7	3.2	81.35	0.005	0.246
Polyglycerol-10- monooleato	358	DIBMA	92.7	3.2	287.3	0.005	0.279
Span 20™	1061	DIBMA	92.7	3.2	117.3	0.005	0.149
Triton X- 100™	10.07	DIBMA	92.7	3.2	120.9	0.005	0.334
Triton X-45™	156.3	DIBMA	92.7	3.2	84.06	0.005	0.311
Tween 20™	9.173	DIBMA	92.7	3.2	87.81	0.005	0.278
Tween 65™	114.5	DIBMA	92.7	3.2	89.57	0.005	0.229
Tween 85™	189.8	DIBMA	92.7	3.2	155.7	0.005	0.246
Apo 10	5.835	SMA-2000™	5.242	2.6	4.889	0.005	0.188
Apo12	82.41	SMA-2000™	5.242	2.6	4.387	0.005	0.421
Glucósido de Coco	27.32	SMA-2000™	5.242	2.6	7.668	0.0025	0.467
Genapol X 080	10.58	SMA-2000™	5.242	2.6	107.6	0.005	0.165
HEGMDDE H370	8.218	SMA-2000™	5.242	2.6	4.938	0.005	0.419
HEGMDE H360	6.033	SMA-2000™	5.242	2.6	3.87	0.0025	0.147
HEGMOE H350	5.505	SMA-2000™	5.242	2.6	92.13	0.005	0.146
HXEGMDDE	9.351	SMA-2000™	5.242	2.6	179	0.0025	0.26

H375							
pGBTM- MNA-C ₁₃	6.423	SMA-2000™	5.242	2.6	6.47	0.00125	0.221
pGBTEM- MNA-C ₁₄	7.548	SMA-2000™	5.242	2.6	6.38	0.005	0.404
nDDDTp D342	11.67	SMA-2000™	5.242	2.6	113.3	0.0025	0.211
nDDTGP D323	262.2	SMA-2000™	5.242	2.6	143.3	0.005	0.264
nDDTP D335	6.881	SMA-2000™	5.242	2.6	168.3	0.005	0.249
OEGMDE 0330	8.099	SMA-2000™	5.242	2.6	121.9	0.0025	0.236
Poliglicerol-10- monolaurato	114.8	SMA-2000™	5.242	2.6	101.2	0.005	0.3
Poliglicerol-10- monoelato	358	SMA-2000™	5.242	2.6	123.1	0.005	0.172
Span 20™	1061	SMA-2000™	5.242	2.6	97.93	0.005	0.293
Triton X- 100™	10.07	SMA-2000™	5.242	2.6	139.7	0.00125	0.188
Triton X- 305™	10.66	SMA-2000™	5.242	2.6	121.7	0.0025	0.468
Triton X-45™	156.3	SMA-2000™	5.242	2.6	90.85	0.0025	0.201
Tween 20™	9.173	SMA-2000™	5.242	2.6	97.91	0.0025	0.389
Tween 40™	9.691	SMA-2000™	5.242	2.6	133	0.0025	0.605
Tween 60™	134.2	SMA-2000™	5.242	2.6	6.555	0.00125	0.173
Tween 65™	114.5	SMA-2000™	5.242	2.6	164	0.0025	0.25
Tween 80™	10.42	SMA-2000™	5.242	2.6	130	0.0025	0.416
Tween 85™	189.8	SMA-2000™	5.242	2.6	9.903	0.00125	0.4
Apo 10	5.835	SMA-2021™	6.627	3.7	8.087	0.005	0.142
Apo 12	82.41	SMA-2021™	6.627	3.7	11.56	0.005	0.166
Glucósido de Coco	27.32	SMA-2021™	6.627	3.7	13.26	0.005	0.323
HEGMDDE	8.218	SMA-2021™	6.627	3.7	10.53	0.005	0.298

H370							
HEGMDE H360	6.033	SMA-2021™	6.627	3.7	8.217	0.0025	0.514
HXEGMDDE H375	9.351	SMA-2021™	6.627	3.7	6.601	0.005	0.309
pGBTM- MNA-C ₁₃	6.423	SMA-2021™	6.627	3.7	8.065	0.005	0.104
pGBTEM- MNA-C ₁₄	7.548	SMA-2021™	6.627	3.7	7.101	0.005	0.16
nDDTGP D323	262.2	SMA-2021™	6.627	3.7	8.654	0.0025	0.248
nDDDTTP D342	11.67	SMA-2021™	6.627	3.7	8.19	0.0025	0.278
OEGMDE 0330	8.099	SMA-2021™	6.627	3.7	5.706	0.005	0.27
Poliglicerol-10- monolaurato	114.8	SMA-2021™	6.627	3.7	22.34	0.005	0.238
Poliglicerol-10- monooleato	358	SMA-2021™	6.627	3.7	120.7	0.005	0.276
Triton X- 100™	10.07	SMA-2021™	6.627	3.7	5.144	0.005	0.152
Triton X-45™	156.3	SMA-2021™	6.627	3.7	6.222	0.005	0.093
Tween 40™	9.691	SMA-2021™	6.627	3.7	9.262	0.005	0.337
Tween 60™	134.2	SMA-2021™	6.627	3.7	8.687	0.00125	0.317
Tween 80™	10.42	SMA-2021™	6.627	3.7	10.39	0.005	0.441
Tween 85™	189.8	SMA-2021™	6.627	3.7	121.4	0.005	0.304
Apo 10	5.835	SMA-3000™	3.713	2.8	163.1	0.005	0.252
Apo 12	82.41	SMA-3000™	3.713	2.8	221	0.005	0.293
Glucósido de Coco	27.32	SMA-3000™	3.713	2.8	16.23	0.005	0.199
Genapol X 080	10.58	SMA-3000™	3.713	2.8	53.86	0.005	0.429
HEGMDE H370	8.218	SMA-3000™	3.713	2.8	43.06	0.005	0.137

HEGMDE H360	6.033	SMA-3000™	3.713	2.8	79.51	0.005	0.457
HXEGMDDE H375	9.351	SMA-3000™	3.713	2.8	79.11	0.005	0.498
DDDM- MNA-C ₁₂	6.122	SMA-3000™	3.713	2.8	6.911	0.005	0.151
pGBTM- MNA-C ₁₃	6.423	SMA-3000™	3.713	2.8	7.306	0.005	0.212
pGBTEM- MNA-C ₁₄	7.548	SMA-3000™	3.713	2.8	7.266	0.005	0.085
nDDDT D342	11.67	SMA-3000™	3.713	2.8	10.04	0.005	0.241
nDDTGP D323	262.2	SMA-3000™	3.713	2.8	201.3	0.005	0.466
OEGMDE 0330	8.099	SMA-3000™	3.713	2.8	27	0.005	0.404
Poliglicerol-10- monolaurato	114.8	SMA-3000™	3.713	2.8	20.32	0.005	0.131
Poliglicerol-10- monooleato	358	SMA-3000™	3.713	2.8	218.7	0.005	0.263
Poliglicerol- 10-monopalmitato	111.8	SMA-3000™	3.713	2.8	165.4	0.0005	0.391
Span 20™	1061	SMA-3000™	3.713	2.8	102.8	0.005	0.175
Triton X- 100™	10.07	SMA-3000™	3.713	2.8	181.2	0.005	0.295
Triton X-45™	156.3	SMA-3000™	3.713	2.8	249	0.005	0.318
Tween 60™	114.5	SMA-3000™	3.713	2.8	356.4	0.005	0.806
Tween 85™	189.8	SMA-3000™	3.713	2.8	167.8	0.005	0.422
Apo 12	82.41	SMA-IBE	9.759	5.4	11	0.005	0.31
Glucósido de Coco	27.32	SMA-IBE	9.759	5.4	9.499	0.0025	0.236
HEGMDDE H370	8.218	SMA-IBE	9.759	5.4	8.579	0.0025	0.189
HEGMDE H360	6.033	SMA-IBE	9.759	5.4	11.05	0.005	0.288

HXEGMDDE H375	9.351	SMA-IBE	9.759	5.4	12.07	0.005	0.278
nDDDTp D342	11.67	SMA-IBE	9.759	5.4	13.19	0.005	0.326
nDDTP D335	6.881	SMA-IBE	9.759	5.4	13.2	0.005	0.311
Poliglicerol-10- monooleato	358	SMA-IBE	9.759	5.4	95.55	0.005	0.52
Triton X-45™	156.3	SMA-IBE	9.759	5.4	6.882	0.005	0.292
Tween 85™	189.8	SMA-IBE	9.759	5.4	82.56	0.00125	0.201
Genapol X 080	10.58	SMA-725™	15.03	6.8	19.55	0.005	0.319
nDDDTp D342	11.67	SMA-725™	15.03	6.8	9.736	0.005	0.301
nDDTGP D323	262.2	SMA-725™	15.03	6.8	12.29	0.005	0.336
Poliglicerol-10- monooleato	358	SMA-725™	15.03	6.8	240.5	0.005	0.451
Span 20™	1061	SMA-725™	15.03	6.8	98.31	0.005	0.561
HEGMDDE H370	8.218	SMA-725™	15.03	6.8	14.64	0.0025	0.231
HEGMDE H360	6.033	SMA-725™	15.03	6.8	11.75	0.0025	0.111
HXEGMDDE H375	9.351	SMA-725™	15.03	6.8	11.44	0.005	0.437
pGBTEM- MNA-C ₁₄	7.548	SMA-725™	15.03	6.8	55.4	0.005	0.429
Poliglicerol-10- monopalmitato	111.8	SMA-725™	15.03	6.8	14.62	0.0025	0.234
Triton X- 100™	10.07	SMA-725™	15.03	6.8	10.5	0.005	0.475
Triton X-45™	156.3	SMA-725™	15.03	6.8	14.02	0.0025	0.328
Tween 65™	114.5	SMA-725™	15.03	6.8	14.71	0.0025	0.233
Tween 80™	10.42	SMA-725™	15.03	6.8	9.102	0.005	0.608

Apo 10	5.835	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.232	0.005	0.14
Apo 12	82.41	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.923	0.005	0.266
PFDMP O310F	23.83	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.484	0.005	0.228
Genapol X 080	10.58	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	5.366	0.005	0.25
HEGMDDE H370	8.218	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.557	0.005	0.069
HEGMDE H360	6.033	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.55	0.005	0.398
HXEGMDDE H375	9.351	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	5.153	0.005	0.118
DDDM- MNA-C ₁₂	6.122	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.801	0.005	0.238
pGBTM- MNA-C ₁₃	6.423	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.561	0.005	0.237
nDDDTp D342	11.67	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.652	0.005	0.224
nDDTGP D323	262.2	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.424	0.005	0.221
nDDTP D335	6.881	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.659	0.005	0.248
OEGMDE 0330	8.099	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.706	0.005	0.232
Poliglicerol-10-monolaurato	114.8	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.869	0.005	0.248
Poliglicerol-10-monoooleato	358	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	127.9	0.005	0.305
Span 20™	1061	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	91.93	0.005	0.292
Triton X-100™	10.07	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.643	0.005	0.228

Triton X-45™	156.3	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	5.305	0.005	0.103
Tween 65™	114.5	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	4.677	0.005	0.276
Tween 85™	189.8	SMA- Cumene terminated	7.123	1.5	8.387	0.005	0.349

Tabla 10. Caracterización de la Dispersión Dinámica de la Luz de Agregados de Nanorred con Tensioactivos Aniónicos							
Tensioactivo	Diámetro del Agregado de Tensioactivo [nm] (Intensidad Media d)	Polímero	Diámetro del Agregado de Polímero [nm]	Diámetro del Agregado de Polímero Calculado [nm]	Diámetro Agregado de Nanorred [nm]	Concentración	Índice de Poli Dispersidad (PDI)
Stepan Bio-Soft D-40™	5.13	DIBMA	92.7	3.2	70.62	0.005	0.5
Lakeland PAE 136	7.924	DIBMA	92.7	3.2	93.72	0.005	0.197
Stepan Lathanol LAL™	6.814	DIBMA	92.7	3.2	83.64	0.005	0.32
n-Decanoil-L-Treonina	90.68	DIBMA	92.7	3.2	92.49	0.005	0.283
n-Dodecanoil-L-Treonina	99.77	DIBMA	92.7	3.2	98.7	0.005	0.259
n-Decanoil-L-Metionina	85.47	DIBMA	92.7	3.2	95.33	0.005	0.246
n-Dodecanoil-L-Metionina	2.312	DIBMA	92.7	3.2	104.2	0.005	0.34
Stepan Ninate	216.2	DIBMA	92.7	3.2	163.6	0.005	0.196
n-Octanoil-L-Metionina	116.6	DIBMA	92.7	3.2	95	0.005	0.3
Stepan Mild L3™	372.9	DIBMA	92.7	3.2	92.22	0.005	0.185
Stepan Bio-Terge AS-40™	6.434	SMA 2000™	5.242	2.6	132.7	0.0025	0.452

Stepan Bio-Soft D-40™	5.13	SMA 2000™	5.242	2.6	132.5	0.0025	0.354
Sal sódica del ácido dodecano-1-sulfónico	5.108	SMA 2000™	5.242	2.6	8.054	0.000625	0.454
Lakeland PAE 136	7.924	SMA 2000™	5.242	2.6	143	0.0025	0.203
Stepan Lathanol LAL™	6.814	SMA 2000™	5.242	2.6	6.541	0.005	0.153
n-Decanoil-L-Metionina	85.47	SMA 2000™	5.242	2.6	82.64	0.00125	0.399
n-Dodecanoil-L-Metionina	2.312	SMA 2000™	5.242	2.6	5.89	0.0025	0.203
n-Decanoil-L-Treonina	90.68	SMA 2000™	5.242	2.6	152.4	0.00125	0.347
n-Dodecanoil-L-Histidina	99.96	SMA 2000™	5.242	2.6	94.7	0.005	0.288
Stepan Mild L3™	372.9	SMA 2000™	5.242	2.6	58.51	0.0025	0.494
n-Dodecanoil-L-Treonina	99.77	SMA 2000™	5.242	2.6	124.6	0.005	0.302
Dodecylbencenosulfonato de sodio	4.235	SMA 2000™	5.242	2.6	2.775	0.005	0.458
Stepan Ninat 41™	216.2	SMA 2000™	5.242	2.6	131.4	0.0025	0.435
Stepan SLL-FB™	136.3	SMA 2000™	5.242	2.6	147.7	0.0025	0.312
Stepan Sulfonic acid™	2.821	SMA 2000™	5.242	2.6	5.508	0.0025	0.416
Sal sódica del ácido dodecano-1-sulfónico	5.108	SMA 2021™	6.627	3.7	8.378	0.0025	0.361
Lakeland PAE	7.924	SMA 2021™	6.627	3.7	6.351	0.0025	0.235

136™							
Stepan Lathanol LAL™	6.814	SMA 2021™	6.627	3.7	4.209	0.005	0.393
n-Decanoil-L-Metionina	85.47	SMA 2021™	6.627	3.7	8.205	0.0025	0.341
Cedepal TD-403 MFLD™	6.421	SMA 2021™	6.627	3.7	7.653	0.0025	0.311
Stepan Mild L3™	372.9	SMA 2021™	6.627	3.7	4.174	0.0025	0.42
n-Dodecanoil-L-Metionina	2.312	SMA 2021™	6.627	3.7	7.181	0.0025	0.406
n-Decanoil-L-Metionina	85.47	SMA 3000™	3.713	2.8	173.2	0.005	0.179
n-Dodecanoil-L-Metionina	2.312	SMA 3000™	3.713	2.8	185.3	0.005	0.24
n-Decanoil-L-Treonina	90.68	SMA 2021™	6.627	3.7	129.3	0.0025	0.41
n-Dodecanoil-L-Treonina	99.77	SMA 2021™	6.627	3.7	8.825	0.005	0.332
Dodecylbencenosulfonato de sodio	4.235	SMA 2021™	6.627	3.7	6.732	0.005	0.147
Stepan Ninat	216.2	SMA 2021™	6.627	3.7	27.73	0.005	0.397
Stepan SLL-FB™	136.3	SMA 2021™	6.627	3.7	8.91	0.005	0.151
Stepan Sulfonic acid™	2.821	SMA 2021™	6.627	3.7	7.86	0.005	0.153
Lakeland PAE 136	7.924	SMA 3000™	3.713	2.8	127.7	0.005	0.153
n-Dodecanoil-L-Treonina	99.77	SMA 3000™	3.713	2.8	126.3	0.005	0.155
Stepan Ninat	216.2	SMA 3000™	3.713	2.8	104.6	0.005	0.269

Stepan Mild L3™	372.9	SMA 3000T™	3.713	2.8	139.1	0.005	0.233
Stepan SLL-FB™	136.3	SMA 3000T™	3.713	2.8	7.09	0.005	0.24
Stepan Sulfonic acid™	2.821	SMA 3000T™	3.713	2.8	178.8	0.005	0.381
n-Decanoil-L-Metionina	85.47	SMA IBE	9.759	5.4	14.43	0.005	0.29
n-Dodecanoil- L-Metionina	2.312	SMA IBE	9.759	5.4	13.37	0.005	0.323
Stepan Mild L3™	372.9	SMA IBE	9.759	5.4	13.98	0.005	0.29
Stepan SLL-FB™	136.3	SMA IBE	9.759	5.4	13.59	0.005	0.3
AminGCK30H	7.286	SMA 725™	15.03	6.8	126.6	0.00125	0.65
Stepan Bio-Terge AS-40™	6.434	SMA 725™	15.03	6.8	131.1	0.00125	0.689
n-Dodecanoil- L-Histidina	99.96	SMA 725™	15.03	6.8	92.95	0.00125	0.555
Stepan Lathanol LAL™	6.814	SMA 725™	15.03	6.8	122.7	0.0025	0.647
n-Decanoil-L-Metionina	85.47	SMA 725™	15.03	6.8	107.2	0.0025	0.538
n-Dodecanoil- L-Metionina	2.312	SMA 725™	15.03	6.8	124.3	0.005	0.692
Sal sódica del ácido dodecano-1-sulfónico	5.108	SMA 725™	15.03	6.8	126	0.005	0.682
Lakeland PAE 136	7.924	SMA 725™	15.03	6.8	132.1	0.0025	0.658
n-Dodecanoil- L-Treonina	99.77	SMA 725™	15.03	6.8	126.1	0.005	0.687
Stepan Mild L3™	372.9	SMA 725™	15.03	6.8	102.9	0.0025	0.601
Stepan SLL-FB™	136.3	SMA 725™	15.03	6.8	99.11	0.0025	0.577

Lakeland PAE 136	7.924	SMA Cumene terminated	7.123	1.5	4.65	0.005	0.232
n-Dodecanoil- L- Treonina	99.77	SMA Cumene terminated	7.123	1.5	4.464	0.005	0.235
Stepan Mild L3™	372.9	SMA Cumene terminated	7.123	1.5	4.621	0.005	0.236
Stepan SLL-FB™	136.3	SMA Cumene terminated	7.123	1.5	4.551	0.005	0.229
n-Decanoil-L- Metionina	85.47	SMA Cumene terminated	7.123	1.5	3.699	0.005	0.288
n-Dodecanoil- L- Metionine	2.312	SMA Cumene terminated	7.123	1.5	3.903	0.005	0.122
n-Dodecanoil- L- Histidina	99.96	SMA Cumene terminated	7.123	1.5	83.07	0.0025	0.403

Cromatografía de permeación en gel (gpc)

[00271] El análisis de distribución de peso molecular del polímero de polímeros de poli(estireno-co-anhídrido maleico) disponibles comercialmente se determinó mediante cromatografía de permeación en gel (GPC) en un Viscotek GPCmax VE-2001 usando una calibración convencional de estándares de poliestireno a 2 mg/ml usando tetrahidrofurano (THF) como eluyente a 1 ml/min. Antes de la inyección, las muestras se filtraron utilizando un filtro de nailon de 0,22 μm . Las mediciones fueron realizadas por GreenCentre Canada.

Tabla 11. Datos de Distribución de Peso Molecular (Mn, Mw, Mz, Mp, D) de Diferentes Muestras de Polímero					
	SMA-725™	SMA-2000™	SMA-2021™	SMA-3000™	SMA- Cumene terminated
Mn (Daltons)	48,216	3,268	10,029	4,667	3,983
Mw (Daltons)	97,987	5,793	23,727	8,767	7,708
Mz (Daltons)	170,089	9,020	84,311	14,042	12,598
M _p (Daltons)	81,853	4,839	17,096	7,648	6,486
0 (Mw/Mn)	2.032	1.773	2.366	1.879	1.935

Experimento de formación de nanorred - método #1

[00272] A cada pocillo de una placa de 96 pocillos se le añadieron 200 ppm de solución madre de polímero al 2% seguido de la adición de una solución madre de tensioactivo al 1% seleccionada de una de las siguientes seis concentraciones (1000 ppm, 500 ppm, 250 ppm, 125 ppm, 50 ppm y 0 ppm). La mezcla de polímero y tensioactivo se

diluyó en agua desionizada hasta un volumen final de 200 μ l en cada pocillo. A la mezcla se le añadieron 10 μ l de ácido clorhídrico (HCl) 12 M como agente de precipitación. Se observó la formación de nanorred con base en el grado de turbidez de la mezcla en cada pocillo. El grado de turbidez (un indicador de la formación de nanorred) se determinó mediante mediciones de absorbancia a 540 nm en un Molecular Devices-SPECTRAMax M2. Cada combinación de tensioactivo y polímero se ejecutó por triplicado.

Eficiencia de formación de nanorred - método #2

[00273] El Método #2 describe la eficiencia de complejación de nanorred de los tensioactivos que contienen Triton™ X (Triton™ X-100, Triton™ X-305 y Triton™ X-45) con polímeros que contienen SMA (SMA-725™, SMA -2000™, SMA-2021™, SMA-3000™). El propósito era identificar la capacidad de carga de tensioactivo del polímero y estudiar el efecto de la longitud del polímero. Para el rango de concentraciones de tensioactivo empleado, se utilizó una relación de dos veces el factor de formación de nanorred (Nf) para cada tensioactivo seleccionado y polímero seleccionado. Se seleccionaron un total de seis concentraciones. El factor de formación de nanorred (Nf) se calculó mediante el método #4 y se resalta a continuación. Para cada titulación, la concentración de polímero fue de 400 ppm (20 μ L).

Titulación de nanorred:

La titulación de tensioactivo y polímero a concentraciones dadas (ver más abajo) se realizó usando tubos de centrífuga de 1,5 ml, seguido de dilución en agua desionizada hasta un volumen final de 1,0 ml. La nanorred resultante se obtuvo mediante la adición de 10 µl de HCl 12M. La titulación se realizó por triplicado. Además, se prepararon un control de tensioactivo en agua desionizada y un control separado que contenía una mezcla de tensioactivo y HCl. Una porción (aprox. 200 µl) de la nanorred preparada, el control de tensioactivo y el control de tensioactivo con HCl se transfirieron a una placa de 96 pocillos y se midió la absorción a 540 nm. La solución restante de las nanorredes preparadas, control de tensioactivo con y sin ácido se sedimentó usando una centrífuga Sigma™ 4-16 a 2300 rpm (816 ref) durante 10 min. El sobrenadante (aprox. 200 µl) se transfirió a una placa UV de 96 pocillos y se midió la absorción a 280 nm. Se registró un promedio de los valores de absorción.

[00274] Estas son las siguientes concentraciones de tensioactivo y polímero empleadas: SMA-2000™ (400 ppm, 20 µL), Triton™ X-100 (1000, 500, 250, 100, 64.8, 0 ppm); SMA-725™ (400 ppm, 20 µL), Triton™ X-100 (1000, 500, 295, 16, 250, 100, 0 ppm); SMA-3000™ (400 ppm, 20 µL), Triton™ X-100 (1000, 500, 250, 100, 13,4, 0 ppm); SMA-2021™ (400 ppm, 20

μL), Triton™ X-100 (1000, 500, 250, 91,22, 0 ppm).

[00275] SMA-2000™ (400 ppm, 20 μL), Triton™ X-305 (1000, 500, 250, 231,58, 100, 0 ppm); SMA-725™ (400 ppm, 20 μL), Triton™ X-305 (1000, 500, 473,76, 250, 100, 0 ppm); SMA-3000™ (400 ppm, 20 μL), Triton™ X-305 (1000, 500, 447,88, 250, 100, 0 ppm); SMA-2021™ (400 ppm, 20 μL), Triton™ X-305 (1000, 500, 436,88, 250, 100, 0 ppm).

[00276] SMA-2000™ (400 ppm, 20 μL), Triton™ X-45 (1000, 616,18, 500, 250, 100, 0 ppm); SMA-725™ (400 ppm, 20 μL), Triton™ X-45 (1000, 500, 250, 100, 92,92, 0 ppm); SMA-3000™ (400 ppm, 20 μL), Triton™ X-45 (1000, 500, 250, 99,7, 0 ppm); SMA-2021™ (400 ppm, 20 μL), Triton™ X-305 (1000, 500, 250, 158,4, 100, 0 ppm).

Eliminación de iones metálicos Zn^{2+} y Cu^{2+} del agua de mar - método #3

[00277] Se mezclaron soluciones de polímero hidrolizado y tensioactivo en agua desionizada en placas de 96 pocillos para dar un total de 1 ml de soluciones madre de biblioteca de nanorred al 0,5%. Se prepararon 199 nanorredes diferentes. Cada pocillo de una placa de 96 pocillos contenía una única solución de nanorred de 1 ml.

Determinación colorimétrica de concentraciones de zinc y cobre usando zincon:

Como prueba del principio de la biblioteca de nanorred optimizada, se añadió agua de mar con 10 ppm de zinc o

cobre y se trató con nanorreeds. El procedimiento de tratamiento fue el siguiente. Para preparar las soluciones de agua de mar con adición de metal, se añadió un volumen de 175 μL de la solución 100 nM Zn^{2+} (28.765 ppm Zn^{2+}) o 315 μL de la solución 100 nM Cu^{2+} a 500 ml de agua de mar, lo que produjo una solución de 10.07 ppm de Zn^{2+} y 10,03 ppm de Cu^{2+} , respectivamente. A continuación, se trató un volumen de 960 μl de esta muestra con 40 μl de cada solución de biblioteca de nanorred optimizada (Tabla 9 y Tabla 10). Como control positivo para la eliminación de metales, se trataron alícuotas separadas de 960 μl de las muestras de agua de mar con adición de metal con 40 μl de solución de NaOH al 1% para precipitar el Zn o Cu como hidróxidos. Para asegurar la estabilidad del metal en el agua de mar, también se mezclaron alícuotas adicionales de 960 μl de las soluciones de agua de mar con adición de metal con 40 μl de agua destilada. Las soluciones se mezclaron individualmente y cada una de ellas se centrifugó (1.000 x g) durante aproximadamente 5 minutos para sedimentar las nanorreeds precipitadas. Se analizaron cinco μl del sobrenadante aplicando el método de eliminación de iones metálicos Zn^{2+} y Cu^{2+} .

Preparación de curvas de calibración para el método #3

Elaboración de patrones de calibración

[00278] Para el ion metálico Zn^{2+} disuelto, los

estándares de calibración se prepararon en concentraciones de 0,10, 0,26, 0,52, 1,03, 1,75, 2,52 ppm, y para Cu^{2+} disuelto, los estándares de calibración se prepararon en concentraciones 0,10, 0,25, 0,5, 1,0, 1,74, 2,49 ppm.

Preparación de curvas de calibración para Zn^{2+} y Cu^{2+} disueltos

[00279] En un conjunto de tubos de centrífuga cónicos de 1,5 ml, se añadieron alícuotas de 25 μl de las soluciones estándar de calibración de Zn^{2+} . En otro conjunto de tubos de centrífuga cónicos de 1,5 ml, se añadieron alícuotas de 25 μL de las soluciones estándar de calibración de Cu^{2+} . A ambos conjuntos de tubos, se añadieron 950 μL de tampón de ácido bórico pH 9 y los tubos se mezclaron seguido de la adición de 25 μL de solución de Zincon 1,6 M (75% de contenido de colorante). Las soluciones se mezclaron y se dejaron reposar durante 5 minutos. Se transfirieron alícuotas de 200 μl de las muestras a placas de fondo plano de 96 pocillos adecuadas para espectrofotometría visible y se midieron las muestras a 615 nm. Se construyeron curvas de calibración separadas para Zn^{2+} y Cu^{2+} .

Elaboración de curvas de calibración para remoción de hierro

[00280] El siguiente procedimiento se basa en M. J. Verschoor, L. A. Molot, Limnol. Oceanogr-Meth., (2013), 11,

113-125. Una comparación de tres métodos colorimétricos de medición de hierro ferroso y reactivo total en agua dulce, (doi:10.4319/lom.2013.11.113). El procedimiento en el mismo se modificó y adaptó para cuantificar el hierro total y disuelto en muestras de agua. Se prepararon en agua soluciones de 20.000 ppm de Fe^{2+} , ácido ascórbico al 10% y ferrozina 2,5 mg/ml. La solución de 20.000 ppm de Fe^{2+} se diluyó a concentraciones apropiadas para preparar los estándares de calibración. Tanto Fe^{2+} como Fe^{3+} se cuantificaron usando la curva de calibración preparada para Fe^{2+} en el rango de 0,1 - 2,0 ppm en agua desionizada.

Preparación de patrones de calibración

[00281] Los patrones de calibración se prepararon en concentraciones de 0,10, 0,25, 0,50, 1,0 y 2,50 ppm mediante diluciones en serie de la solución madre de Fe^{2+} de 20.000 ppm con agua desionizada.

Preparación de la curva de calibración

[00282] En tubos de centrífuga cónicos de 1,5 ml se añadió 1 ml de los estándares de calibración Fe^{2+} y 100 μL de ácido ascórbico al 10%. Las soluciones se mezclaron y se dejaron reposar durante 10 minutos. Se añadieron veinticinco μL de la solución de ferrozina de 2,5 mg/ml y se dejaron reposar las muestras durante 10 min. Se transfirieron alícuotas de 200 μL de las muestras a placas de fondo plano de 96 pocillos adecuadas para

espectrofotometría visible y se analizaron a 562 nm.

[00283] Se aplicó el mismo procedimiento para medir las concentraciones de hierro total y hierro disuelto.

[00284] Las concentraciones residuales de Zn^{2+} y Cu^{2+} se analizaron mediante determinación colorimétrica mediante complejación con Zincon. El método Zincon está adaptado de un procedimiento descrito en (E. Sabel, J. M. Neureuther, S. Siemann. Anal. Biochem., (2010), 397, 2, 218-226, (doi: 10.1016/j.ab.2009.10.037). A Spectrophotometric Method for the Determination of Zinc, Copper, and Cobalt ions in metalloproteins using Zincon Crystal). El procedimiento allí descrito se modificó y adaptó para cuantificar los iones metálicos Zn^{2+} y Cu^{2+} disueltos en muestras de agua.

Cálculos teóricos - método #4:

La coprecipitación de 7 polímeros hidrolizados y 58 tensioactivos con concentraciones variables dio como resultado nanorredes con varios grados de turbidez. Se midió la turbidez y se modeló el aumento de los valores de absorción a medida que se añadía tensioactivo al polímero. Se calcularon los primeros valores de absorción inicial p y a_s , que se estimaron como funciones lineales de concentración para un polímero o tensioactivo dado cuando se midieron solos. A continuación, se calcularon los valores de absorción corregidos de la línea de base (A') restando a_p y a_s a partir de los valores de absorción

brutos A, es decir, $A' = A - a_s - a_p$.

[00285] Para cada combinación de polímero y tensioactivo, se construyó una curva $A'(S, P_0)$, donde S es una concentración variable de tensioactivo y P_0 es una concentración fija de polímero. Se identificó el pico de esta curva y se ajustó un sigmoide a la sección anterior al pico de la curva (R, función óptima). El coeficiente sigmoide estimado permitió la cuantificación de la altura del pico, el punto medio de transición y la tasa de transición.

[00286] Para una combinación dada de un tensioactivo y un polímero, la formación de nanorred se definió como cualquier ajuste sigmoide con una altura superior a 0,2. Además, se eliminó cualquier sigmoide con un punto medio superior a 500 ppm, ya que la titulación finalizó en 1000 ppm y la curva sigmoidea requirió al menos 3 puntos de datos para ser una curva válida. La inspección visual confirmó que los ataques sigmoides de A' eran un método útil para detectar la formación de nanorred. En total, se detectaron nanorredes optimizadas que se produjeron entre 199 de las 434 posibles combinaciones de tensioactivos y polímeros ($62 * 7$).

Síntesis de tensioactivos

[00287] Los espectros de resonancia magnética nuclear (RMN) se realizaron en las instalaciones de

GreenCentre Canadá. Los espectros de RMN de ^1H y $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ se registraron en un espectrómetro Varian™ de 400 MHz a temperatura ambiente. Los cambios químicos se informan en partes por millón (ppm) utilizando tetrametilsilano (TMS) como estándar [^1H (CDCl_3 : 7,26 ppm; DMSO-d_6 : 2,50 ppm) y ^{13}C [CDCl_3 : 77,16 ppm; DMSO-d_6 : 39,52 ppm] La multiplicidad de desplazamientos químicos se informa de la siguiente manera: s = singlete, d = doblete, dd = doblete de dobletes, t = triplete, m = multiplete y br = ancho. Los espectros de RMN se procesaron utilizando el software MestReNova. Los espectros de espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) se registraron en un espectrómetro FTIR Agilent Cary 630 equipado con un ATR de diamante (reflectancia total atenuada) y una ventana de ZnSe con un rango espectral de 650-4000- cm^{-1} . La ruta sintética de N-Dodecanoil-L-Metionina se hace referencia en (3) G. Bonacucina et al. Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects, **2016**, 492, 38-46. Chemical-Physical Properties and Cytotoxicity of N-Decanoyl Amino Acid-Based Surfactants: Effect of Polar Heads.

Síntesis de n-dodecanoil-l-metionina

[00288] A un matraz de fondo redondo de 100 ml con una barra de agitación magnética se le añadieron metionina (1,50 g, 10 mmol), H_2O (20 ml) y Na_2CO_3 (1,57 g, 15 mmol). Se añadió THF (10 ml) y la mezcla se volvió turbia. Se

añadió gota a gota cloruro de n-dodecanoilo (3,0 ml, 13 mmol) y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 4 h. Después del tiempo indicado, se evaporó THF a presión reducida y la mezcla de reacción se acidificó hasta pH 2,0 (con HCl 2 N). Se formó un precipitado y se filtró usando un embudo Buchner, con papel de filtro #2 y se lavó con agua (3 x 10 ml) y acetona (aproximadamente 5-10 ml). El sólido se secó en un horno de vacío a 40 °C, durante la noche. El sólido se recristalizó en hexanos. Luego, el precipitado se filtró y se lavó con hexanos (3 x 10 ml), para proporcionar un producto puro, como un sólido blanco (1,786 g, 54% de rendimiento). ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 6.83 (d, $J = 7,6$ Hz, 1H, NHCO), 4.57 (dd, $J = 12,4, 4,8$ Hz, 1H), 2.54 (t, $J = 7,6$ Hz, 2H), 2.23 (t, $J = 7,6$ Hz, 2H), 2.19 - 2.13 (m, 1H), 2.09 (s, 3H), 2.04-1.95 (m, 1H), 1.63-1.56 (m, 2H), 1.31 -1.25 (m, 15H), 0.87 (t, $J = 6,8$ Hz, 3H). ^{13}C NMR (100 MHz, CDCl_3) δ 175,7 (COOH), 174,7 (CONH), 52,3 (HC- NH), 36,6 ($\text{O}=\text{C}-\text{CH}_2$), 32,0 ($\text{OC}-\text{CH}_2-\text{CH}_2$), 31,2 (CH_2), 30,3 (CH_2), 29,8 (CH_2), 29,7 (CH_2), 29,7 (CH_2), 29,5 (CH_2), 29,5 (CH_2), 29,4 (CH_2), 25,8 (CH_2), (CH_2), 15,6 (SCH_2), 14,3 (CH_3); FT-IR (ATR, cm^{-1}): 3303, 2938, 2916, 2849, 1702, 1706, 1646, 1535, 1419, 1226, 685.

Síntesis de n-decanoil-l-metionina

[00289] A un matraz de fondo redondo de 100 ml con una barra de agitación magnética, se le añadieron metionina

(1,50 g, 10 mmol), H₂O (20 ml) y Na₂CO₃ (1,6 g, 15 mmol). Tras la adición de THF (10 ml) a la mezcla de reacción se formó una solución turbia, se añadió gota a gota cloruro de n-decanoilo (2,7 ml, 13 mmol) y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 4 h. El disolvente THF se evaporó a presión reducida y la mezcla de reacción se acidificó hasta pH 2,0 (con HCl 2 N). A pH 3-4, se observó algo de precipitado y a pH 2 se formó un aceite en la parte superior de la mezcla de reacción. La mezcla de reacción se extrajo con hexanos (30 ml) y EtOAc (acetato de etilo) (2 x 20 ml). Se combinaron las fases orgánicas y se eliminó el disolvente a presión reducida. Se aisló un aceite y se almacenó en el frigorífico hasta que se obtuvo un sólido. El sólido se recrystalizó en hexanos, se filtró y se lavó con hexanos (3 x 10 ml), para proporcionar un sólido incoloro puro (2,516 g, rendimiento del 83%). ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 10,18 (br, 1H), 6,55 (d, J = 7,6 Hz, 1H, NHCO), 4,71 (dd, J = 12,8, 5,6 Hz, 1H), 2,55 (t, J = 7,4 Hz, 2H), 2,36 - 2,17 (m, 3H), 2,10 (s, 3H), 2,08-1,99 (m, 1H), 1,68-1,58 (m, 2H), 1,28-1,25 (m, 12H), 0,87 (t, J = 6,8 Hz, 3H). ¹³C NMR (100 MHz, CDCl₃) δ 175,1 (COOH), 174,7 (CONH), 51,9 (HC-NH), 36,6 (O=C-CH₂), 32,0 (OC-CH₂-CH₂), 31,2 (CH₂), 30,1 (CH₂), 29,6 (CH₂), 29,4 (CH₂), 29,4 (CH₂), 29,3 (CH₂), 29,3 (CH₂), (CH₂), 22,8 (CH₂), 15,5 (SCH₂), 14,2 (CH₃); FT-IR (ATR, cm⁻¹): 3314, 2916, 2849, 1706, 1650,

1535, 1441, 1419, 1255, 1229, 920, 685.

Síntesis de n-octanoil-l-metionina

[00290] A un matraz de fondo redondo de 100 ml con una barra de agitación magnética se le añadieron metionina (1,50 g, 10 mmol), H₂O (20 ml) y Na₂CO₃ (1,6 g, 15 mmol). Tras la adición de THF (10 ml) a la mezcla de reacción se formó una solución turbia, se añadió gota a gota cloruro de n-octanoílo (2,2 ml, 13 mmol) y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 4 h. El disolvente THF se evaporó a presión reducida en una línea Schlenk y la mezcla de reacción se acidificó hasta pH 2,0 (con HCl 2 N). Se formó un aceite encima de la mezcla de reacción. La mezcla de reacción se extrajo con EtOAc (3 x 20 ml). Se combinaron las fases orgánicas y se eliminó el disolvente a presión reducida. Se obtuvo un aceite y se almacenó en el interior del frigorífico para solidificarlo. El sólido se recrystalizó en hexanos, se filtró y se lavó con hexanos (3 x 10 ml), para proporcionar un sólido incoloro puro (1,194 g, 43% de rendimiento). ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 10,54 (br, 1H), 6,58 (d, J = 7,6 Hz, 1H, NHCO), 4,70 (dd, J = 12,6, 5,0 Hz, 1H), 2,54 (t, J = 7,4 Hz, 2H), 2,25 (t, J = 7,6 Hz, 2H), 2,21 - 2,17 (m, 1H), 2,09 (s, 3H), 2,08 - 2,00 (m, 1H), 1,63 - 1,60 (m, 2H), 1,28 - 1,25 (m, 8H), 0,86 (t, J = 6,6 Hz, 3H). ¹³C NMR (100 MHz, CDCl₃) δ 175,0 (COOH), 174,7 (CONH), 51,9 (HC-NH), (O=C-CH₂), 31,8 (OC-CH₂-CH₂),

31,2 (CH₂), 30,1 (CH₂), 29,2 (CH₂), 29,1 (CH₂), 25,7 (CH₂), 22,7 (CH₂), 15,5 (SCH₂), 14,2 (CH₃); FTIR (ATR, cm⁻¹): 3329, 2942, 2919, 2856, 1698, 1612, 1549, 1445, 1248, 1225, 1188, 1128, 957.

Síntesis de n-dodecanoil-l-histidina

[00291] A un matraz de fondo redondo de 100 ml con una barra de agitación magnética, se le añadieron histidina (1,55 g, 10 mmol), H₂O (20 ml) y Na₂CO₃ (1,38 g, 13 mmol) seguido de la adición de THF (10 ml). La mezcla de reacción se enfrió a 0 °C, tras lo cual la mezcla se volvió turbia. Se añadió gota a gota cloruro de N-dodecanoilo (2,5 ml, 11 mmol) y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante la noche. Antes de la adición completa de cloruro de acilo, la solución se volvió turbia y viscosa (similar a un gel). Después de 4 h de reacción, el disolvente THF se evaporó a presión reducida y la mezcla de reacción se acidificó hasta pH 2,0 (con HCl 2 N). El precipitado se filtró y se lavó con acetona (3 x 5 ml) y CHCl₃ (3x5 ml). El espectro de RMN ¹H del producto crudo mostró ácido dodecanoico residual y el crudo se recrystalizó en EtOH al 95%. Los sólidos se filtraron y lavaron con EtOH al 95%. El sólido incoloro obtenido se contaminó con aproximadamente un 12% de ácido dodecanoico (1,197 g, aproximadamente un 35% de rendimiento). ¹H NMR (400 MHz, DMSO-d₆): δ 8,01 (d, J = 7,6 Hz, 1H, NHCO), 7,54 (s, 1H, N=CHN), 6,78 (s, 1H, NCH=),

4,41-4,35 (m, 1H, NCHCOOH), 2,94-2,77 (m, 2H, CH₂), 2,05 (t, J = 7,4 Hz, 2H, COCH₂), 1,41-1,38 (m, 2H), 1,27-1,20 (m, 16H, CH₂), 0,85 (t, J = 6,8 Hz, 3H, CH₃). ¹³C NMR (100 MHz, DMSO-d₆): δ 173,3 (COOH), 172,1 (CONH), 134,7 (NC=N), 52,1 (HC-NH), 35,2 (O=C-CH₂), 31,4 (O=C-CH₂-CH₂), 29,1 (CH₂), 29,1 (CH₂), 29,0 (CH₂), 28,9 (CH₂), 28,8 (CH₂), (CH₂), 25,2 (CH₂), 22,1 (CH₂), 14,0 (CH₃); FTIR (ATR, cm⁻¹): 3329, 3146, 2945, 2919, 2852, 1639, 1546, 1397, 1184, 983, 834, 685.

Síntesis de n-dodecanoil-l-treonina

[00292] A un matraz de fondo redondo de 100 ml con una barra de agitación magnética, se le añadió treonina (1,20 g, 10 mmol), H₂O (20 ml) y Na₂CO₃ (1,60 g, 15 mmol). Luego, THF (10 ml) se añadió y la mezcla se volvió turbia, se añadió gota a gota cloruro de n-dodecanoilo (3,0 ml, 13 mmol) y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 4 h. El disolvente THF se evaporó a presión reducida y la mezcla de reacción se acidificó hasta pH 2,0 (con HCl 2 N). El precipitado incoloro se filtró y se lavó con agua desionizada (3x10 ml) y se secó en un horno de vacío a 40 °C durante 3 días. El sólido incoloro (1,10 g, 36%) se purificó mediante recristalización en hexanos. ¹H NMR (400 MHz, DMSO-d₆): δ 7,75 (d, J = 8,8 Hz, 1H, NHCO), 4.20 (dd, J = 8,8, 3,2 Hz, 1H, CH-NH), 4,13-4,07 (m, 1H, CH-OH), 2,26-2,11 (m, 2H, O=C-CW₂), 1,49-1,46 (m, 2H, CH₂), 1,23

(m, 15H, CH₂), 1,04 (d, J = 6,4 Hz, 3H, CHOH-CH₃), 0,85 (t, J = 6,8 Hz, 3H, CH₃); ¹³C NMR (100 MHz, DMSO-d₆): δ 172,7 (COOH), 172,4 (CONH), 66,5 (HC-OH), 57,4 (HC-NH), 35,1 (O=C-CH₂), 32,0 (OC-CH₂-CH₂), 29,1 (CH₂), 29,0 (CH₂), (CH₂), 28,8 (CH₂), 28,7 (CH₂), 25,4 (CH₂), 22,5 (CH₂), 20,5 (HOHC-CH₃), 14,1 (CH₃); FTIR (ATR, cm⁻¹): 3426, 3362, 3314, 2942, 2919, 2852, 1709, 1612, 1605, 1538, 1463, 1385, 1382, 1207, 1151, 1088, 871, 674.

Síntesis de n-decanoil-l-treonina

[00293] A un matraz de fondo redondo de 100 ml con una barra de agitación magnética se le añadieron treonina (1,20 g, 10 mmol), H₂O (20 ml) y NaOH (0,6 g, 15 mmol). Luego, se añadió THF (10 ml), seguido de la adición gota a gota de cloruro de n-decanoílo (2,7 ml, 13 mmol) y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante la noche. Se obtuvo una suspensión y el disolvente THF se evaporó a presión reducida y la mezcla de reacción se acidificó hasta pH 2 (con HCl 2 N). No se observó precipitado. La mezcla de reacción se extrajo con EtOAc (3 x 20 ml). Se combinaron las fases orgánicas y se eliminó el disolvente a presión reducida. Se obtuvo un aceite y se purificó usando un tapón corto de sílice, eluido con Hex/EtOAc 6:4 para eliminar el ácido decanoico, y luego con EtOAc, para eliminar el producto, un sólido incoloro (1,326 g, 49% de rendimiento). ¹H NMR (400 MHz, CDCh): δ 7,00 (d, J = 8,8 Hz, 1H, NHCO),

4,54 (d, $J = 6,4$ Hz, 1H, CH- NH), 4,43-4,41 (m, 1H, CH-OH), 2,29 (t, $J = 7,6$ Hz, 2H, O=C-CH₂), 1,64-1,60 (m, 2H, CH₂), 1,28-1,25 (m, 15H, CH₂), 1,20 (d, $J = 6,4$ Hz, 3H, CHOH-CH₃), 0,87 (t, $J = 6,6$ Hz, 3H, CH₃); ¹³C NMR (100 MHz, CDCl₃): δ 175,5 (COOH), 174,3 (CONH), 67,7 (HC-OH), 57,8 (HC-NH), 36,5 (O=C-CH₂), 32,0 (O=C-CH₂-CH₂), 32,0 (CH₂), 29,7 (CH₂), 29,7 (CH₂), 29,6 (CH₂), 29,5 (CH₂), 29,4 (CH₂), 29,4 (CH₂), 25,9 (CH₂), 22,8 (CH₂), 19,6 (HOHC-CH₃), 14,2 (CH₃); FTIR (ATR, cm⁻¹): 3426, 3363, 3314, 2938, 2919, 2852, 1709, 1616, 1605, 1538, 1419, 1382, 1277, 1270, 1199, 1151, 1087, 875, 675.

Síntesis de n-octanoil-l-treonina

[00294] A un matraz de fondo redondo de 100 ml con una barra de agitación magnética se le añadió treonina (1,20 g, 10 mmol), H₂O (20 ml) y Na₂CO₃ (1,60 g, 15 mmol). Luego, se añadió THF (10 ml), seguido de la adición gota a gota de cloruro de n-octanoilo (2,2 ml, 13 mmol). La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 4 h. Después del tiempo indicado, se evaporó el THF a presión reducida y la mezcla de reacción se acidificó hasta pH 2,0 (con HCl 2 N). No se observó precipitado. La mezcla de reacción se extrajo con 3 x EtOAc (20 ml cada una). Las fases orgánicas se combinaron y el disolvente se eliminó a presión reducida para producir un aceite. El aceite se purificó usando un tapón corto de sílice, eluido con

Hex/EtOAc 6:4 para eliminar el ácido decanoico, y luego con EtOAc para eliminar el producto (1,039 g, 42% de rendimiento). ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ 7,01 (d, J = 8,4 Hz, 1H, NHCO), 4,54 (dd, J = 8,4, 2,4 Hz, 1H, CH-NH), 4,42-4,40 (m, 1H, CH-OH), 2,29 (t, J = 7,6 Hz, 2H, O=C-CH_2), 1,63-1,60 (m, 2H, CH_2), 1,30-1,25 (m, 10H, CH_2), 1,19 (d, J = 6,0 Hz, 3H, CHOH-CH_3), 0,86 (t, J = 6,8 Hz, 3H, CH_3); ^{13}C NMR (100 MHz, CDCl_3): δ 176,3 (COOH), 173,7 (CONH), 67,7 (HC-OH), 57,5 (HC-NH), 36,4 (O=C-CH_2), 32,5 ($\text{O=C-CH}_2\text{-CH}_2$), 29,1 (CH_2), 25,8 (CH_2), 22,7 (CH_2), 19,4 (HOHC-CH_3), 14,0 (CH_3); FTIR (ATR, cm^{-1}): 3303, 2942, 2927, 2856, 1724, 1631, 1534, 1419, 1415, 1382, 1210, 1117, 1084, 1080, 857, 674.

Ejemplo 15

Formación de nanorred

[00295] Para cribar rápidamente la formación de nanorredes usando cualquier combinación particular de tensioactivo y polímero, se utilizó un enfoque basado en titulación. Se añadieron cantidades crecientes de tensioactivo a una cantidad fija de polímero. La posterior desestabilización del polímero mediante la adición de ácido clorhídrico concentrado conduce a la precipitación tanto del tensioactivo como del polímero, lo que indica la formación de nanorred. La cantidad de formación de nanorred se midió mediante un aumento en la absorbancia a 540 nm en relación con los controles de solo polímero y solo

tensioactivo. Este método se puede utilizar como un enfoque rápido y automatizado para detectar interacciones polímero-tensioactivo con el fin de observar el inicio de la formación de nanorred en cualquier combinación dada de polímero(s) y tensioactivo(s) (ver Reactivos y Materiales Ejemplos 15-21, Método #1).

Formación de nanorredes con la serie de tensioactivos triton™ y validación de un método de cribado.

[00296] Para probar la formación de nanorred con múltiples tensioactivos y polímeros diferentes, se diseñó un método de cribado que utiliza la coprecipitación del tensioactivo y el polímero como medida de la formación de nanorred. Para probar el método de detección, se midió primero la formación de nanorred entre los tensioactivos modelo, seleccionados de la serie Triton™, con copolímeros de bloques de estireno y ácido maleico de diferente longitud y composición de bloques (Figura 15). La serie de tensioactivos Triton™ corresponde a moléculas anfipáticas con una cadena alquilo hidrófoba de 14 carbonos y un grupo de cabeza hidrófilo compuesto por grupos oxietileno repetidos (véase la Fórmula (i) anterior). Al aumentar el número de grupos oxietileno repetidos, el valor HLB del tensioactivo aumenta y el tamaño del agregado de tensioactivo del tensioactivo resultante disminuye. Esta tendencia permite la creación de tensioactivos con química

similar pero propiedades físicas de humectación, formación de espuma y agregación radicalmente diferentes (Stubicar and Petres, Micelle Formation by Tritons in Aqueous Solutions, (1981), Croatia Chemica Acta, 54 (3) 255-266).

[00297] Utilizando los polímeros SMA y la serie de tensioactivos Triton™, se puede validar el método de selección para el inicio de la formación de nanorred. Lo que sigue a continuación es una comparación de la formación de nanorretas usando tamaños de partículas de polímero SMA relativamente más pequeños y relativamente más grandes en combinación con tamaños de agregados de tensioactivo relativamente más pequeños y relativamente más grandes dentro de la serie de tensioactivos Triton™. Por tanto, se pudieron observar muchas combinaciones posibles de tamaño relativo. Los tensioactivos Triton™ empleados fueron los siguientes (junto con los tamaños de agregados tensioactivos medidos): (Triton X-45™: 156 nm) y un tensioactivo formador de micelas pequeñas (Triton X-100™: 10 nm). Los tamaños de partículas de polímero se detallan a continuación junto con los resultados.

[00298] Se observó un claro aumento en la absorbancia indicativo de la formación de nanorred con Triton X-100™ y SMA-2000™ ($D_{\text{calculado}}$: 2,6 nm, observado: 5,2 nm) y SMA-3000™ ($D_{\text{calculado}}$: 2,8 nm, $D_{\text{observado}}$: 3,7 nm) (Figura 15). Por el contrario, el SMA-725™ relativamente

más grande ($D_{\text{calculado}}$: 6,8 nm, $D_{\text{observado}}$: 10-15 nm) mostró un pequeño aumento en la absorbancia con Triton X-100™. Los tres polímeros mostraron un fuerte aumento en la absorbancia con el agregado de tensioactivo más grande formado por Triton X-45™. Para confirmar que este aumento en la absorbancia correspondía a la formación de nanorred (y no a la mera precipitación de un componente dado), el precipitado se eliminó de la solución por centrifugación. El tensioactivo residual que queda en la solución se midió mediante la absorbancia UV de los tensioactivos Triton™ para SMA 2000 y SMA 725 (Tabla 21). Los resultados demostraron que el aumento del precipitado formado era proporcional a la correspondiente disminución de la concentración de tensioactivo en el sobrenadante. Este resultado valida la coprecipitación como un método de detección válido para medir la formación de nanorred (véanse los Ejemplos de reactivos y materiales 15-21, método #2). Los resultados obtenidos del método de cribado respaldan la proposición de que la formación de nanorred está influenciada por un desajuste de tamaño entre un tamaño mínimo de partícula de polímero y el tamaño de agregado de tensioactivo. Por ejemplo, esta proposición puede expresarse como sigue: ($D_{\text{polímero}} < D_{\text{tensioactivo agregado}} = \text{nanorred}$), y puede visualizarse a través del método de cribado automatizado rápido relativamente simple detallado

anteriormente. Los resultados ilustrados se muestran en la Figura 15.

Ejemplo 16

Conversión del método de cribado de nanorred a un método de alto rendimiento y medición de la formación de nanorred.

[00299] Para medir mejor la formación de nanorred entre varios tensioactivos y numerosos polímeros, se desarrolló un método de puntuación cuantitativo y relativamente más automatizado para detectar la formación de nanorred. Considere primero el método de detección simple descrito anteriormente y validado. En esa validación, se asumió que la formación de nanorred ocurría entre un copolímero de bloque único y un agregado de tensioactivo único. Lo que sigue es la descripción de un modelo asistido por computadora desarrollado para predecir, estandarizar y calificar la formación de nanorredes.

[00300] Una curva de unión de un gráfico X-Y de absorbancia a 540 nm frente a la concentración de tensioactivo se ajustó con una función sigmoidea después de la corrección de los artefactos de tensioactivo solamente (Figura 16). A partir del ajuste sigmoide, se determinó un factor de formación de nanorred (Nf). Nf, se toma del ajuste sigmoide como la mitad del valor máximo del sigmoide. Nf también puede denominarse punto medio,

concentración media máxima o concentración de agregación crítica. El ajuste sigmoide también proporcionó valores para la altura absoluta del sigmoide y la pendiente de la curva sigmoidea.

[00301] Las curvas sigmoides con una pendiente más pronunciada pueden resultar de la asociación rápida de todo el tensioactivo disponible con el polímero. Esto se ha descrito como un sello distintivo de la cooperatividad relativamente alta de la unión del tensioactivo polimérico. (Goddard E.D. Polymer/Surfactant Interaction-Its relevance to Detergent Systems. JAOCs. Vol. 71, 1994). De manera similar, las curvas sigmoides con una absorbancia máxima relativamente más alta pueden ser indicativas de la asociación de más tensioactivo disponible con el polímero, y también pueden indicar una formación de nanorred más eficiente. A partir de estos dos parámetros de la curva sigmoidea (pendiente y absorbancia máxima), se utilizó el área bajo la curva sigmoidea como puntuación para la formación de nanorred (Figura 17). Se considera que el factor de formación de nanorred (Nf) es el punto en el que la mitad del polímero disponible se asoció con el tensioactivo.

[00302] Para resumir, en este método automatizado, se consideró que la formación de nanorred comenzaba basándose en un ajuste sigmoide de los parámetros tomados

de los gráficos de absorbancia frente a la concentración de tensioactivo. Se calculó una puntuación de nanorred utilizando el área bajo la curva sigmoidea (AUC). Si no se detectó sigmoide, se determinó que la formación de nanorred no se había producido. Cada combinación de polímero y tensioactivo se puntuó de forma independiente. Los valores de AUC resultantes se escalaron entre 0 y 1. La puntuación resultante, así escalada, puede ser indicativa de la formación de nanorred. La puntuación escalada captura dos aspectos. Primero, captura la altura del perfil de absorción, lo que puede indicar cantidades relativamente mayores de nanorredes formadas. En segundo lugar, captura el rango de concentración de tensioactivo (para una concentración de polímero fija) sobre el que se forman las nanorredes. Los resultados ilustrados se muestran en la Figura 17.

Ejemplo 17

La formación de nanorred ocurre con tensioactivos aniónicos y no iónicos.

[00303] En esta sección, se llevó a cabo un estudio de la influencia de la estructura química del grupo de cabeza de tensioactivo sobre la formación de nanorred. Se examinó la formación de nanorred con tensioactivos que contienen varios grupos de cabeza no iónicos e iónicos. Los grupos de cabeza se clasificaron por el grupo químico

funcional que forma las interacciones primarias con el agua en solución, el número de grupos funcionales repetidos y el enlace a la cadena alquilo hidrófobo. Excepto por las combinaciones que se muestran a continuación (Tablas 13 y 14), la formación de nanorredes se detectó con todos los demás tensioactivos probados (Tablas 12 A-D).

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coefficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
1,2-Hexanodiol	DIBMA	0.1	901.088435	55.485365	0.08909591
Amphosol 2CSF™	DIBMA	0.77027187	595.08416	92.7298755	0.01197528
Apo 10	DIBMA	0.84774592	438.416181	95.641022	0.02734266
Apo 12	DIBMA	1.02744699	84.1216144	20.6225583	0.05375417
Stepan Bio Soft D-40™	DIBMA	0.50324237	154.38828	15.7339089	0.23726898
Cedepal TD-403 MFLD™	DIBMA	0.16418752	155.336851	21.5040037	0.1078598
Glucósido de Coco	DIBMA	0.54794297	117.587414	11.5384967	0.07657559
Ácido dodecano-l-sulfónico	DIBMA	0.1	113.103271	22.0604016	0.06354805
PFDMP-O310F	DIBMA	0.62275273	653.987409	69.6324963	0.02728391
Genapol X080	DIBMA	0.71496667	20.9693868	1	0.52045649
HEGMDDE H370	DIBMA	0.77233692	22.9310378	6.94012383	0.31281476
HEGMDE H360	DIBMA	0.73495559	15.6419746	1	0.22670991
HEGMOE H350	DIBMA	0.21723333	31.5858482	1.67734031	0.14408076
HXEGMDDE H375	DIBMA	0.61635555	48.9368401	1	0.16375448
Lakeland PAE 136™	DIBMA	0.61441111	45.4594876	2.03653556	0.31629426
Stepan Lathanol LAL™	DIBMA	0.26535556	50.1592844	1	0.17633476
MNAC ₁₂	DIBMA	0.35946774	96.4098691	21.0225132	0.21215451
MNAC ₁₃	DIBMA	0.44239109	127.190065	19.3785602	0.21842851
MNAC ₁₄	DIBMA	0.37788666	107.360025	27.9020346	0.22240426
n-Decanoil-L-Metionina	DIBMA	0.72673333	22.5959793	1	0.42891738
n-Decanoil-L-Treonina	DIBMA	0.72474944	326.332201	21.5716367	0.15178313
n-Dodecanoil-L-Histidina	DIBMA	0.26962716	112.97279	55.8505974	0.14662091
n-Dodecanoil-L-Metionina	DIBMA	0.41636667	19.6303579	1.00005512	0.31618239
n-Dodecanoil-L-Treonina	DIBMA	0.68847777	122.622926	1	0.13991125
n-Octanoil-L-Metionina	DIBMA	0.30027282	480.892315	122.694584	0.10060373

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
Dodecilbencenosulfonato de sodio	DIBMA	0.17219996	53.1225689	4.99559612	0.14861309
nDDDTp D342	DIBMA	1.08387992	143.724993	28.3862408	0.32460789
nDDTGP D323	DIBMA	1.00681667	162.687526	1	0.81488173
nDDTP D335	DIBMA	1.02878536	658.069895	111.181966	0.04566893
Ninate 411™	DIBMA	0.30978354	155.42648	25.6747016	0.16191695
nNDTP N335	DIBMA	0.86906633	565.917927	17.1427281	0.02297988
OEGMDE 0330	DIBMA	0.6817	12.4022252	1	0.40518747
Poli-10-laurato	DIBMA	0.42863333	56.1286226	3.54827919	0.25251619
Poli-10-oleato	DIBMA	0.8523417	42.6516533	3.03531455	0.09171199
Poli-10-estearato	DIBMA	0.51043339	503.701113	4.14415278	0.03461897
Span 20™	DIBMA	0.24467942	43.3092107	6.61452179	0.08822107
Stepan Mild L3™	DIBMA	0.35162074	130.031097	66.1989563	0.10881984
Stepan SLL FB™	DIBMA	0.14626668	559.237685	19.3401413	0.02347724
Stepan sulfonic acid™	DIBMA	0.19633275	47.7084451	5.07352302	0.19511718
TC Lab 35	DIBMA	0.71271471	334.20971	69.445712	0.04069248
Triton X-100™	DIBMA	0.84218245	88.2041539	37.3457156	0.3181006
Triton X-305™	DIBMA	0.1	91.8020987	72.9726761	0.06771337
Triton X-45™	DIBMA	0.97430833	44.3902689	2.65271092	0.21510792
Tween 20™	DIBMA	0.2062	59.4954843	2.56038525	0.16107583
Tween 40™	DIBMA	0.1	8.45029038	1	0.10140582
Tween 60™	DIBMA	0.12510002	35.0104779	1	0.11411969
tween 65™	DIBMA	0.39536667	27.3521657	1	0.20251538
Tween 80™	DIBMA	0.1	42.5149373	4.84881196	0.10169357
Tween 85™	DIBMA	1.1473	50.0724917	1	0.7354596
Sulfonato de 1-octano	SMA 2000™	0.1	534.878493	583.851199	0.02086525

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coefficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
AminGCK 30H	SMA 2000™	0.12479326	36.4305728	13.0012012	0.09493266
Amphosol 2CSF™	SMA 2000™	0.89738859	526.085102	85.0942317	0.12821088
Apo 10	SMA 2000™	0.66099518	235.351463	49.4562223	0.04355634
Apo 12	SMA 2000™	0.83502697	43.9420198	3.6786668	0.11565243
Stepan Bio Soft D-40™	SMA 2000™	0.79162791	137.979405	85.4989689	0.4041504
Stepan Bio Terge AS-40™	SMA 2000™	0.92848624	253.779429	165.263877	0.46161255
Glucósido de Coco	SMA 2000™	1.26892037	332.677184	125.515767	0.38850904
Ácido dodecano-l-sulfónico	SMA 2000™	0.56516733	160.502073	24.1015342	0.28669766
PFDMP-O310F	SMA 2000™	1.01532665	680.265245	38.2248183	0.01984661
Genapol X080	SMA 2000™	1.0753076	11.7682243	3.36750959	0.77029655
HEGMDDE H370	SMA 2000™	1.09769487	21.7341727	3.09134026	0.50035298
HEGMDE H360	SMA 2000™	1.12000001	14.0557595	1	0.10236606
HEGMOEH350	SMA 2000™	0.91326667	29.6281823	1.50144269	0.5367388
HXEGMDDE H375	SMA 2000™	1.28238258	11.1512028	1.64726731	0.48667566
Lakeland PAE 136™	SMA 2000™	0.66803889	5.39012428	1	0.37215477
Stepan Lathanol LAL™	SMA 2000™	0.74126316	91.8029172	14.1917398	0.48785472
MNAC ₁₃	SMA 2000™	0.6319667	128.761567	3.711762	0.37348738
MNAC ₁₄	SMA 2000™	0.99491667	392.376055	1	0.46130594
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 2000™	0.73880069	49.794164	4.61655421	0.43712689
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 2000™	0.73130093	456.577364	38.4224003	0.03601437
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 2000™	1.61427321	374.522858	139.368208	0.50129881
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 2000™	0.4084	57.0809993	2.23986642	0.1950195
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 2000™	0.9988012	75.5389069	22.2511234	0.30337225
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 2000™	0.8677396	595.722748	128.683455	0.1129965
Dodecylbencenosulfonato de sodio	SMA 2000™	0.82733333	58.4154015	3.15064529	0.52388549

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coefficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
nDDDTTP D342	SMA 2000™	1.1908412	133.315281	28.3191444	0.66418528
nDDTGP D323	SMA 2000™	1.10939784	41.8240721	9.60983666	0.97587682
nDDTP D335	SMA 2000™	1.20761612	378.515512	44.2671138	0.01731967
Ninate 411™	SMA 2000™	0.56074691	124.95851	7.4506132	0.28406656
nNDTP N335	SMA 2000™	1.22379909	556.256227	16.7117816	0.01241129
OEGMDE 0330	SMA 2000™	1.09319861	14.89518	1.89476483	0.65447037
Poli-10-laurato	SMA 2000™	1.20588317	86.2204713	42.8109052	0.59840684
Poli-10-oleato	SMA 2000™	0.52048013	333.405039	40.5367025	0.43078348
Poli-10-estearato	SMA 2000™	1.07071039	682.310738	67.9169494	0.02250116
Span 20™	SMA 2000™	0.88136828	210.360538	40.0411291	0.23162938
Stepan Mild L3™	SMA 2000™	0.75077124	258.170262	149.886645	0.14475193
Stepan SLI FB™	SMA 2000™	0.97317757	77.8264966	32.5773193	0.6772525
Stepan sulfonic acid™	SMA 2000™	0.58338839	30.4316496	13.1990135	0.4432083
TC Lab 35	SMA 2000™	0.97102218	165.127063	35.7111399	0.41573918
Triton X-100™	SMA 2000™	1.090175	30.9867367	1	0.72468072
Triton X-305™	SMA 2000™	0.42093514	52.7835175	15.5976649	0.30439504
Triton X-45™	SMA 2000™	0.95685104	309.862067	45.4754577	0.36300713
Tween 20™	SMA 2000™	0.91024998	34.984391	10.9797071	0.57074161
Tween 40™	SMA 2000™	0.85543611	3.17731708	1	0.68636157
Tween 60™	SMA 2000™	0.9335923	39.2492665	10.5156914	0.73452283
Tween 65™	SMA 2000™	1.00891099	88.268573	44.9631639	0.50517267
Tween 80™	SMA 2000™	0.6415	5.33232732	1.15717371	0.55961401
Tween 85™	SMA 2000™	1.16957282	27.4118067	6.90087914	0.77074868
VDISTILL DV53™	SMA 2000™	0.13904954	71.4810149	11.2021876	0.10627094
VDISTILL DV63™	SMA 2000™	0.15760566	123.096414	4.36983785	0.08516374

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coefficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
Sulfonato de sodio-1 octano	SMA 2021™	0.1	935.389666	161.242254	0.00725711
AminGCK 30H	SMA 2021™	0.16113336	127.913092	1	0.16408753
Amphosol 2CSF™	SMA 2021™	1.13313179	699.363304	130.974204	0.04151624
Ácido antraquinona-2-sulfónico	SMA 2021™	0.1	144.475114	4.22812193	0.08545977
Apo 10	SMA 2021™	0.40881668	424.402176	82.9898363	0.02397257
Apo 12	SMA 2021™	0.43479445	45.8318637	9.10508678	0.04698531
Cedepal TD-403 MFLD™	SMA 2021™	0.37948356	202.197224	355.854349	0.19519247
Glucósido de Coco	SMA 2021™	0.98464268	195.488268	98.3074408	0.54331317
Ácido dodecano-1-sulfónico	SMA 2021™	0.31287633	231.295941	87.00054	0.18335223
PFDMP-O310F	SMA 2021™	0.4981352	512.350393	14.1993402	0.06167963
Genapol X080	SMA 2021™	2	575.161187	228.267432	0.61372737
HEGMDDE H370	SMA 2021™	1.3322001	28.222288	1	0.72265722
HEGMDE H360	SMA 2021™	1.23872227	15.2556935	1	0.34880255
HEGMOE H350	SMA 2021™	1.26373384	48.4702544	1	0.83467596
HXEGMDDE H375	SMA 2021™	1.28879888	19.5782657	2.56428128	0.23248461
Lakeland PAE 136™	SMA 2021™	1.4386872	85.0790029	63.634503	0.73781132
Stepan Lathanol LAL™	SMA 2021™	0.57771661	141.186295	51.5380326	0.30928375
MNAC ₁₃	SMA 2021™	0.2409385	134.849306	46.1029803	0.17162141
MNAC ₁₄	SMA 2021™	0.78835514	283.952241	73.5407791	0.37225011
n-Decanoil-L-Metionina	SMA2021™	0.891	88.0421719	1	0.49088847
n-Decanoil-L-Treonina	SMA2021™	0.4390166	392.356052	40.0057236	0.05193664
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA2021™	0.41149996	123.17186	1.25778314	0.25692248
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA2021™	0.86790988	50.8818456	4.26347048	0.29433431
n-Octanoil-L-Metionina	SMA2021™	0.60579899	516.821604	12.9652078	0.17133589
Dodecilbencenosulfonato de sodio	SMA2021™	1.09185243	161.669071	19.5260699	0.26996932

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coeeficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
nDDDTp D342	SMA2021™	1.20839103	245.77649	55.2888738	0.6628966
nDDTGP D323	SMA2021™	0.67210572	271.14231	245.389902	0.42141363
nDDTP D335	SMA2021™	1.2873531	603.00528	115.949197	0.0447591
Ninate 411™	SMA2021™	0.9306941	171.064771	20.4236571	0.29365403
nNDTP N335	SMA2021™	0.86373574	547.727127	15.5023812	0.03540623
OEGMDE 0330	SMA2021™	1.32343889	21.8346265	2.90574343	0.62121758
Poli-10-laurato	SMA2021™	1.28228728	155.971849	34.137995	0.52399
Poli-10-oleato	SMA2021™	1.18861032	83.4270066	13.4234048	0.8530148
Poli-10-palmitato	SMA2021™	0.35150268	543.456395	119.620995	0.10326259
Poli-10-estearato	SMA2021™	0.3782	568.843671	1	0.01032824
Span 20™	SMA2021™	0.35694164	0	560.882957	0.27224066
Stepan Mild L3™	SMA2021™	0.69871255	244.417729	105.835039	0.53848898
Stepan SLL FB™	SMA2021™	0.92909918	164.645031	36.1794065	0.66869796
Stepan sulfonic acid™	SMA2021™	0.55220886	55.2137116	37.4305648	0.34163289
TC Lab 35	SMA2021™	0.96554937	389.055194	51.5484316	0.16979021
Triton X-100™	SMA2021™	0.42769999	33.9152557	5.81523546	0.32101287
Triton X-305™	SMA2021™	0.14214001	59.2815788	24.7028952	0.10990348
Triton X-45™	SMA2021™	0.58975329	76.5263381	39.5915588	0.33915197
Tween 40™	SMA2021™	0.36146692	118.71608	85.3871419	0.24266693
Tween 60™	SMA2021™	0.67845333	127.223016	1	0.44119457
Tween 80™	SMA2021™	1.21108659	128.01887	38.4517763	0.78075637
Tween 85™	SMA2021™	0.99793553	44.3368596	37.5045817	0.60323297
Amphosol 2CSF™	SMA 3000™	0.2431068	387.142003	84.7206518	0.05874185
Ácido antraquinona-2-sulfónico	SMA 3000™	0.1	267.220564	203.433114	0.01958907
Apo 10	SMA 3000™	0.59850259	345.652245	63.7069632	0.0446669

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coefficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
Apo 12	SMA 3000™	0.64	22.0604935	1	0.45617241
Glucósido de Coco	SMA 3000™	1.5392872	392.820112	89.9918433	0.5250622
PFDMF-O310F	SMA 3000™	0.35033333	978.524449	1	0.05425814
Genapol X080	SMA 3000™	1.42288709	38.7011311	33.5395704	1.04843213
HEGMDDE H370	SMA 3000™	0.95577965	23.3898301	4.16284629	0.38737013
HEGMDE H360	SMA 3000™	0.99145558	14.9430288	1	0.27724382
HEGMOE H350	SMA 3000™	0.58346666	30.226552	1.32455222	0.38455735
HXEGMDDE H375	SMA 3000™	1.03194568	6.42321656	1	0.40506607
Lakeland PAE 136™	SMA 3000™	0.65675001	13.8265829	2.05437227	0.53884736
Stepan Lathanol LAL™	SMA 3000™	0.15055264	72.3648955	32.957779	0.11609036
MNAC ₁₂	SMA 3000™	0.44480852	213.732813	67.2106088	0.14180333
MNAC ₁₃	SMA 3000™	0.37384604	137.945378	24.257433	0.15204811
MNAC ₁₄	SMA 3000™	0.34348388	148.758063	27.4801783	0.19699695
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 3000™	0.40006551	45.0739894	3.13635836	0.3975135
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 3000™	0.66326463	577.018149	101.155496	0.03172253
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 3000™	0.17466666	50.2447083	1.55294276	0.09766373
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 3000™	0.52365556	90.1723376	1	0.2635066
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 3000™	0.91735595	145.757221	20.6970266	0.27636447
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 3000™	0.70518455	603.060198	78.2084217	0.28379335
Dodecilbencenosulfonato de sodio	SMA 3000™	0.1	98.6810362	46.037207	0.13681818
nDDDTF D342	SMA 3000™	0.94715999	291.719517	77.3415987	0.31719493
nDDTGP D323	SMA 3000™	0.90149358	42.8290789	7.39689134	0.73194673
nDDTP D335	SMA 3000™	1.03777981	540.1365	67.2903046	0.03244535
Ninate 411™	SMA 3000™	0.32081235	107.423919	52.4429783	0.16493285
nNDTP N335	SMA 3000™	1.01744385	674.951314	56.9789227	0.01531551

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
nODTTP 0320	SMA 3000™	0.1	471.641835	112.970763	0.0610347
OEGMDE 0330	SMA 3000™	1.01130002	13.7605991	1	0.64921569
Poli-10-laurato	SMA 3000™	0.73904923	43.3998996	11.3077173	0.49205051
Poli-10-oleato	SMA 3000™	0.37827778	461.91294	1	0.34235745
Poli-10-palmitato	SMA 3000™	0.56899066	42.8717573	11.3588766	0.49671037
Poli-10-estearato	SMA 3000™	0.87370102	573.481425	18.2860756	0.00817572
Span 20™	SMA 3000™	0.88478417	223.911109	59.231853	0.16455893
Stepan Mild L3™	SMA 3000™	0.64376341	248.456385	60.6747749	0.08284202
Stepan SLL FB™	SMA 3000™	0.78988212	71.5162006	26.1873518	0.68163018
Stepan sulfonic acid™	SMA 3000™	0.24164413	28.317891	13.237126	0.22898645
TC Lab 35	SMA 3000™	0.22991524	346.941575	125.389064	0.09589022
Triton X-100™	SMA 3000™	0.6009527	3.28892177	1	0.48131015
Triton X-305™	SMA 3000™	0.14412718	70.8706163	31.6534128	0.11452151
Triton X-45™	SMA 3000™	0.77245801	48.4308877	9.94655414	0.42715311
Tween 65™	SMA 3000™	2	132.474221	243.533814	0.73905917
Tween 85™	SMA 3000™	2	210.604204	168.795922	0.76177281
AminGCK 30H	SMA-IBE	0.13840166	55.1971085	12.9955696	0.08879885
Amphosol 2CSF™	SMA-IBE	0.1	595.782092	359.850059	0.02127168
Apo 10	SMA-IBE	0.27167398	522.590715	179.741526	0.03888101
Apo 12	SMA-IBE	0.55703334	49.9902832	1.00232534	0.2472827
Stepan Bio Soft D-40™	SMA-IBE	0.1	331.505939	57.327707	0.05184201
Glucósido de Coco	SMA-IBE	0.21820058	43.4533724	5.83931635	0.09625545
Fluoro octil maltósido O310F	SMA-IBE	0.1	479.469366	123.671052	0.04984429
HEGMDDE H370	SMA-IBE	0.51316586	109.786116	17.767388	0.07687877
HEGMDE H360	SMA-IBE	0.70257438	271.535997	21.286082	0.14827892

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
HXEGMDDE H375	SMA-IBE	0.83539321	17.972628	4.13175952	0.26012348
Lakeland PAE 136™	SMA-IBE	0.14100002	54.8904151	2.98756606	0.15685401
MNAC ₁₄	SMA-IBE	0.43062183	603.240819	256.721295	0.09519527
n-Decanoil-L-Metionina	SMA-IBE	0.91993334	50.0123255	3.27012462	0.52108808
n-Decanoil-L-Treonina	SMA-IBE	0.51336231	658.954775	70.475536	0.01496219
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA-IBE	0.11277886	114.538291	57.6895038	0.08483761
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA-IBE	0.47576667	92.4348088	1	0.27032538
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA-IBE	0.14354495	318.504378	155.735051	0.0714816
n-Octanoil-L-Metionina	SMA-IBE	0.62686283	716.038034	111.041836	0.07385598
nDDDTp D342	SMA-IBE	0.22859992	54.0350613	2.33743662	0.10447126
nDDTGP D323	SMA-IBE	0.14623362	499.220019	10.1196651	0.22788446
nDDTP D335	SMA-IBE	0.27080924	212.359061	65.2471625	0.09548108
OEGMDE 0330	SMA-IBE	0.11736715	54.4395671	6.07004333	0.07830438
Poli-10-laurato	SMA-IBE	0.11284842	75.6808608	17.7297431	0.03695515
Poli-10-oleato	SMA-IBE	0.39399999	49.7886456	1.03559627	0.15117336
Span 20™	SMA-IBE	0.11276668	504.450638	4.56821982	0.09276794
Stepan Mild L3™	SMA-IBE	0.42979985	123.215334	2.75949469	0.23430997
Stepan SLL FB™	SMA-IBE	0.50575003	49.8392414	1.00617269	0.10171128
Stepan sulfonic acid™	SMA-IBE	0.12123375	56.4878144	5.84092656	0.12913625
Triton X-305™	SMA-IBE	0.1	369.852806	310.374151	0.05229663
Triton X-45™	SMA-IBE	0.3194	31.9394658	1	0.34639209
Tween 60™	SMA-IBE	0.12768971	790.283457	281.753355	0.04439502
Tween 65™	SMA-IBE	0.17028942	244.053429	7.32272882	0.06460263
Tween 85™	SMA-IBE	0.2088	25.346497	1	0.21842755
1,2-Hexanodiol	SMA725™	0.16665356	78.0526029	29.96572	0.0786097

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coefficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
AminGCK 30H	SMA725™	0.21016623	380.083452	165.338014	0.19224575
Amphosol 2CSF™	SMA725™	0.1	398.10186	164.474318	0.04635902
Apo 10	SMA725™	0.34625609	595.290306	129.398525	0.0322409
Apo 12	SMA725™	0.16243333	5.17360531	1.36617645	0.1467061
Stepan Bio Soft D-40™	SMA725™	1.18217395	628.407481	244.949233	0.40729597
Stepan Bio Terge AS-40™	SMA725™	0.81420252	373.201656	182.869165	0.39245615
Ácido dodecano-1-sulfónico	SMA725™	0.37391949	61.5385496	11.5744684	0.49054484
PFDMP-O310F	SMA725™	0.12143325	497.138141	16.0950889	0.03517421
Genapol X080	SMA725™	2	437.146479	188.834499	0.81568587
HEGMDDE H370	SMA 725™	0.40963279	21.1965285	2.60828794	0.3036369
HEGMDE H360	SMA725™	0.94983345	16.0164725	1	0.49167483
HXEGMDDE H375	SMA 725™	0.31032122	6.42321847	1	0.2859397
Lakeland PAE 136™	SMA 725™	0.40092	6.7971917	2.13221812	0.45672292
Stepan Lathanol LAL™	SMA 725™	1.19795721	457.059606	133.528247	0.50554515
MNAC ₁₂	SMA725™	0.1142333	55.1225816	2.58801463	0.09770116
MNAC ₁₄	SMA725™	0.23660233	150.054301	22.1077259	0.16548523
n-Decanoil-L-Metionina	SMA725™	0.58480067	47.3254363	2.68989215	0.3245131
n-Decanoil-L-Treonina	SMA725™	0.58337096	689.059826	63.3478749	0.01010457
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA725™	0.21162515	265.115704	107.553749	0.08328081
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA725™	0.88116667	91.8738612	1	0.52147673
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA725™	0.70376668	127.100453	1.95061246	0.18621891
n-Octanoil-L-Metionina	SMA725™	0.67963151	629.742403	171.134141	0.1470039
nDDTP D342	SMA725™	0.56658422	468.144931	104.513987	0.16931911
nDDTGP D323	SMA725™	0.52058349	295.081064	126.495496	0.50181278
nDDTP D335	SMA725™	0.1	398.778329	175.312356	0.05487862

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
Ninate 411™	SMA725™	0.10989205	80.3623182	34.3296293	0.08815548
nNDTP N335	SMA725™	0.24651841	699.874309	111.827067	0.02225363
OEGMDE 0330	SMA725™	0.19725853	6.4233049	1	0.17818649
Poli-10-laurato	SMA725™	1.22644872	727.140102	150.984716	0.37399647
Poly-10-oleato	SMA725™	0.80395887	415.317226	163.718284	0.32417095
Poli-10-palmitato	SMA725™	0.55378333	220.557022	1	0.34232087
Poli-10-estearato	SMA725™	0.60420715	666.142483	37.0384979	0.01112445
Span 20™	SMA725™	0.62848573	283.912697	107.582548	0.07211668
Stepan Mild L3™	SMA725™	0.70260988	92.7403599	23.4580717	0.14619491
Stepan SLL FB™	SMA725™	0.79445623	88.9172839	27.0557157	0.55123733
Triton X-100™	SMA725™	0.51049104	47.0513106	16.1200228	0.38193929
Triton X-305™	SMA725™	0.1225251	34.2615725	24.79289	0.12988317
Triton X-45™	SMA725™	0.59014722	42.8041791	9.32698688	0.34259304
Tween 65™	SMA725™	0.97100901	58.7517888	4.05623277	0.72301593
Tween 80™	SMA725™	0.47732613	15.04405	6.27578768	0.39298946
VDISTILL DV53™	SMA725™	0.39229689	87.5663909	28.213039	0.23295534
AminGCK 30H	SMA Cumene	0.16903289	56.1552878	40.0446791	0.17652471
Amphosol 2CSF™	SMA Cumene	0.18654925	530.682194	105.573694	0.06440189
Apo 10	SMA Cumene	0.58177855	411.551568	114.32331	0.16331519
Apo 12	SMA Cumene	1.0038667	51.5463032	1	0.68938642
Glucósido de Coco	SMA Cumene	0.73385895	629.210189	118.220275	0.06106245
PFDMP-O310F	SMA Cumene	0.42783337	132.346965	1.94842086	0.32052902
Genapol X080	SMA Cumene	1.07026667	27.4976239	1	0.81008762
HEGMDDE H370	SMA Cumene	1.23098434	113.823501	15.9102869	0.69184844
HEGMDE H360	SMA Cumene	1.11430738	153.280331	26.3897685	0.0453947

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
HEGMOE H350	SMA Cumene	0.15213026	374.958386	184.294742	0.0348972
HXEGMDDE H375	SMA Cumene	1.24640003	14.0977381	1	0.78171728
Lakeland PAE 136™	SMA Cumene	0.99696666	50.2713157	1.66259192	0.57835253
MNAC ₁₂	SMA Cumene	0.23067437	98.3880237	33.0449879	0.15126198
MNAC ₁₃	SMA Cumene	0.22119994	49.6118337	1	0.13610065
MNAC ₁₄	SMA Cumene	0.16250006	26.9122469	16.5961981	0.1679783
n-Decanoil-L-Metionina	SMA Cumene	0.92776667	90.2420667	1	0.49123986
n-Decanoil-L-Treonina	SMA Cumene	0.65673647	648.371055	79.4597391	0.01326363
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA Cumene	0.21763416	45.1571325	9.392309	0.15028436
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA Cumene	0.7225	94.3490016	1	0.3879571
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA Cumene	0.6923	63.335923	3.13250227	0.25086018
n-Octanoil-L-Metionina	SMA Cumene	1.15366359	677.077237	73.1710311	0.03997618
Dodecilbencenosulfonato de sodio	SMA Cumene	0.1	33.2633392	9.9021511	0.17315999
nDDDTp D342	SMA Cumene	1.07132204	278.516346	50.4682219	0.1172323
nDDTGP D323	SMA Cumene	1.16926667	99.7568612	1.00000009	0.39835953
nDDTP D335	SMA Cumene	0.23069617	258.761008	43.8357899	0.102913
nNDTP N335	SMA Cumene	1.0257	843.880546	1	0.25040799
OEGMDE 0330	SMA Cumene	1.20103346	15.8664634	1	0.73328604
Poli-10-laurato	SMA Cumene	0.4544219	73.626828	13.3065884	0.32536092
Poli-10-oleato	SMA Cumene	0.85908063	56.01628	22.6214454	0.44477444
Poli-10-estearato	SMA Cumene	0.779727	660.645528	38.4206269	0.00859737
Span 20™	SMA Cumene	0.75731112	129.430534	3.84638646	0.37532063
Stepan Mild L3™	SMA Cumene	0.40778623	310.08723	51.3347099	0.15323633
Stepan SLL FB™	SMA Cumene	1.05814906	53.2020865	2.27103651	0.87997254
Stepan sulfonic acid™	SMA Cumene	0.12353299	23.2191036	6.38311742	0.16510284

Tabla 12A. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Altura	Midway (ppm)	Coefficiente de pendiente	Error promedio (todos los datos)
TC Lab 35	SMA Cumene	0.31656598	308.812572	62.0939333	0.15751957
Triton X-100™	SMA Cumene	0.66506667	4.67141262	1	0.56561508
Triton X-305™	SMA Cumene	0.15114334	55.3408846	43.0219002	0.12379949
Triton X-45™	SMA Cumene	1.44670135	54.6973778	5.58346883	0.76893364
Tween 40™	SMA Cumene	0.1	40.2306461	5.76851145	0.11282389
Tween 65™	SMA Cumene	0.57494502	22.7324121	11.1524571	0.40483246
Tween 80™	SMA Cumene	0.13393333	26.8482731	1	0.12413461
Tween 85™	SMA Cumene	0.65256667	26.3387849	1	0.4528309

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
1,2-Hexanodiol	DIBMA	0.01079653	0.15517241	C ₆	NA	1
Amphosol 2CSF™	DIBMA	0.31306068	0.51724138	C ₁₈	NA	2
Apo 10	DIBMA	0.47591154	0.70689655	C ₁₀	NA	1
Apo 12	DIBMA	0.94118313	0.98275862	C ₁₂	NA	1
Stepan Bio Soft D-40™	DIBMA	0.42579884	0.67241379	NA- anillo de benceno C ₆	NA	0
Cedepal TD-403 MFLD™	DIBMA	0.13876273	0.27586207	C ₁₃	NA	1
Glucósido de Coco	DIBMA	0.48378552	0.72413793	C ₁₈	NA	1
Ácido dodecano-1-sulfónico	DIBMA	0.08872691	0.18965517	C ₁₂	NA	1
PFDMP-O310F	DIBMA	0.21608623	0.39655172	C ₈	NA	1
Genapol X080	DIBMA	0.70033174	0.82758621	C ₁₃	S	1
HEGMDDE H370	DIBMA	0.75483262	0.87931034	C ₁₂	NA	1
HEGMDE H360	DIBMA	0.72382691	0.86206897	C ₁₀	NA	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
HEGMOEH350	DIBMA	0.21048045	0.36206897	C ₈	NA	1
HXEGMDDE H375	DIBMA	0.58650124	0.75862069	C ₁₂	NA	1
Lakeland PAE 136™	DIBMA	0.5867875	0.77586207	C ₁₃	NA	1
Lathanol LAL™	DIBMA	0.25217819	0.44827586	C ₁₂	NA	1
MNAC ₁₂	DIBMA	0.3249164	0.53448276	C ₁₂	NA	2
MNAC ₁₃	DIBMA	0.38633275	0.62068966	C ₁₃	NA	2
MNAC ₁₄	DIBMA	0.33728709	0.55172414	C ₁₄	NA	2
n-Decanoil-L-Metionina	DIBMA	0.71067545	0.84482759	C ₁₀	NA	1
n-Decanoil-L-Treonina	DIBMA	0.48860273	0.74137931	C ₁₀	NA	1
n-Dodecanoil-L-Histidina	DIBMA	0.23744623	0.43103448	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Metionina	DIBMA	0.40840142	0.65517241	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Treonina	DIBMA	0.60439885	0.79310345	C ₁₂	NA	1
n-Octanoil-L-Metionina	DIBMA	0.1558324	0.29310345	C ₈	NA	1
Dodecilbencenosulfonato de sodio	DIBMA	0.16313833	0.31034483	C ₁₂	NA	1
nDDDTP D342	DIBMA	0.92845061	0.94827586	C ₁₂	NA	1
nDDTGP D323	DIBMA	0.84352356	0.93103448	C ₁₀	NA	1
nDDTP D335	DIBMA	0.35712153	0.56896552	C ₁₀	NA	1
Ninate 411™	DIBMA	0.26177156	0.48275862	C ₁₂	NA	1
nNDDTP N335	DIBMA	0.37768065	0.5862069	C ₉	NA	1
OEGMDE 0330	DIBMA	0.67358625	0.81034483	C ₁₂	NA	1
Poli-10-laurato	DIBMA	0.40478905	0.63793103	C ₁₂	NA	1
Poli-10-oleato	DIBMA	0.81641409	0.9137931	C ₁₈	NA	1
Poli-10-estearato	DIBMA	0.25358274	0.46551724	C ₁₈	NA	1
Span 20™	DIBMA	0.23420274	0.4137931	C ₁₂	NA	1

Tabla 12B. Nanorrede de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
Stepan Mild L3™	DIBMA	0.30304127	0.5	C ₁₂	NA	1
Stepan SLL FB™	DIBMA	0.06454197	0.17241379	C ₁₂	NA	1
Stepan sulfonic acid™	DIBMA	0.18706412	0.32758621	C ₁₂	S	1
TC Lab 35	DIBMA	0.4744805	0.68965517	C ₁₂	NA	1
Triton X-100™	DIBMA	0.76552289	0.89655172	C ₈	S	1
Triton X-305™	DIBMA	0.08905549	0.20689655	C ₈	S	1
Triton X-45™	DIBMA	0.93154568	0.96551724	C ₈	S	1
Tween 20™	DIBMA	0.19403513	0.34482759	C ₁₂	NA	1
Tween 40™	DIBMA	0.09920496	0.24137931	C ₁₆	NA	1
Tween 60™	DIBMA	0.12078276	0.25862069	C ₁₈	NA	1
tween 65™	DIBMA	0.38475022	0.60344828	C ₁₈	NA	3
Tween 80™	DIBMA	0.09579844	0.22413793	C ₁₈	NA	1
Tween 85™	DIBMA	1.09042548	1	C ₁₆	NA	3
Sulfonato de 1-octano	SMA 2000™	0.04864068	0.11864407	C ₈	NA	1
AminGCK 30H	SMA 2000™	0.12021731	0.15254237	C ₁₈ , C ₈	NA	1, 1
Amphosol 2CSF™	SMA 2000™	0.4258668	0.33898305	C ₁₈	NA	2
Apo 10	SMA 2000™	0.50548314	0.38983051	C₁₀	NA	1
Apo 12	SMA 2000™	0.7987517	0.66101695	C ₁₂	NA	1
Stepan Bio Soft D-40™	SMA 2000™	0.67057294	0.55932203	NA- anillo de benceno C ₆	NA	0
Stepan Bio Terge AS-40™	SMA 2000™	0.66514278	0.54237288	C ₁₄	NA	1
Glucósido de Coco	SMA 2000™	0.83736484	0.69491525	C ₁₈	NA	1
Ácido dodecano-1-sulfónico	SMA 2000™	0.47472229	0.3559322	C ₁₂	NA	1
PFDMP-O310F	SMA 2000™	0.3251518	0.22033898	C ₈	NA	1
Genapol X080	SMA 2000™	1.06309757	0.88135593	C ₁₃	S	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
HEGMDDE H370	SMA 2000™	1.07438368	0.91525424	C ₁₂	NA	1
HEGMDE H360	SMA 2000™	1.10481756	0.96610169	C ₁₀	NA	1
HEGMOE H350	SMA 2000™	0.88666487	0.74576271	C ₈	NA	1
HXEGMDDE H375	SMA 2000™	1.2687219	1	C ₁₂	NA	1
Lakeland PAE 136™	SMA 2000™	0.66477033	0.52542373	C ₁₃	NA	1
Stepan Lathanol LAL™	SMA 2000™	0.67356793	0.57627119	C ₁₂	NA	1
MNAC ₁₃	SMA 2000™	0.55090966	0.44067797	C ₁₃	NA	2
MNAC ₁₄	SMA 2000™	0.60503265	0.47457627	C ₁₄	NA	2
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 2000™	0.70238207	0.61016949	C ₁₀	NA	1
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 2000™	0.39777096	0.30508475	C ₁₀	NA	1
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 2000™	0.99824148	0.83050847	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 2000™	0.38529232	0.28813559	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 2000™	0.92313503	0.81355932	C ₁₂	NA	1
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 2000™	0.35486668	0.27118644	C ₈	NA	1
Dodecilbencenosulfonato de sodio	SMA 2000™	0.77941799	0.6440678	C ₁₂	NA	1
nDDDTp D342	SMA 2000™	1.03238155	0.84745763	C ₁₂	NA	1
nDDTGP D323	SMA 2000™	1.06342351	0.89830508	C ₁₀	NA	1
nDDTP D335	SMA 2000™	0.75110832	0.62711864	C ₁₀	NA	1
Ninate 411™	SMA 2000™	0.49095719	0.37288136	C ₁₂	NA	1
nNDTP N335	SMA 2000™	0.54366513	0.42372881	C ₉	NA	1
OEGMDE 0330	SMA 2000™	1.07746121	0.93220339	C ₁₂	NA	1
Poli-10-laurato	SMA 2000™	1.09611792	0.94915254	C ₁₂	NA	1
Poli-10-oleato	SMA 2000™	0.34720409	0.25423729	C ₁₈	NA	1
Poli-10-estearato	SMA 2000™	0.34135375	0.23728814	C ₁₈	NA	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
Span 20™	SMA 2000™	0.6962221	0.59322034	C ₁₂	NA	1
Stepan Mild L3™	SMA 2000™	0.53967414	0.40677966	C ₁₂	NA	1
Stepan SLL FB™	SMA 2000™	0.89518363	0.76271186	C ₁₂	NA	1
Stepan sulfonic acid™	SMA 2000™	0.56522096	0.45762712	C ₁₂	S	1
TC Lab 35	SMA 2000™	0.8108317	0.6779661	C ₁₂	NA	1
Triton X-100™	SMA 2000™	1.05693912	0.86440678	C ₈	S	1
Triton X-305™	SMA 2000™	0.39871505	0.3220339	C ₈	S	1
Triton X-45™	SMA 2000™	0.66079039	0.50847458	C ₈	S	1
Tween 20™	SMA 2000™	0.87847365	0.72881356	C ₁₂	NA	1
Tween 40™	SMA 2000™	0.85312531	0.71186441	C ₁₆	NA	1
Tween 60™	SMA 2000™	0.89719482	0.77966102	C ₁₈	NA	1
Tween 65™	SMA 2000™	0.91446164	0.79661017	C ₁₈	NA	3
Tween 80™	SMA 2000™	0.63839541	0.49152542	C ₁₈	NA	1
Tween 85™	SMA 2000™	1.13795748	0.98305085	C ₁₆	NA	3
VDISTILL DV53™	SMA 2000™	0.12917714	0.16949153	C ₁₈ , C ₁₈	NA	11
VDISTILL DV63™	SMA 2000™	0.13828377	0.18644068	C ₁₈ , C ₁₈	NA	11
Sulfonato de 1-octano	SMA 2021™	0.01470987	0.16814159	C ₈	NA	1
AminGCK 30H	SMA 2021™	0.14060286	0.22123894	C ₁₈ , C ₈	NA	1,1
Amphosol 2CSF™	SMA 2021™	0.35471071	0.45132743	C ₁₈	NA	2
Ácido antraquinona-2-sulfónico	SMA 2021™	0.08560249	0.18584071	NA aromático	NA	0
Apo 10	SMA 2021™	0.23534902	0.2920354	C₁₀	NA	1
Apo 12	SMA 2021™	0.41506008	0.52212389	C ₁₂	NA	1
Cedepal TD-403 MFLD™	SMA 2021™	0.25601338	0.36283186	C ₁₃	NA	1
Glucósido de Coco	SMA 2021™	0.78031574	0.73451327	C ₁₈	NA	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
Ácido dodecano-l-sulfónico	SMA 2021™	0.23883696	0.30973451	C ₁₂	NA	1
PFDMP O310F	SMA 2021™	0.2431645	0.32743363	C ₈	NA	1
Genapol X080	SMA 2021™	0.88125934	0.78761062	C ₁₃	S	1
HEGMDDE H370	SMA 2021™	1.29526847	0.98230088	C ₁₂	NA	1
HEGMDE H360	SMA 2021™	1.22044406	0.92920354	C₁₀	NA	1
HEGMOE H350	SMA 2021™	1.20311221	0.91150442	C ₈	NA	1
HXEGMDDE H375	SMA 2021™	1.26420953	0.94690265	C ₁₂	NA	1
Lakeland PAE 136™	SMA 2021™	1.29580436	1	C ₁₃	NA	1
Stepan Lathanol LAL™	SMA 2021™	0.49459328	0.55752212	C ₁₂	NA	1
MNAC ₁₃	SMA 2021™	0.20799401	0.27433628	C ₁₃	NA	2
MNAC ₁₄	SMA 2021™	0.56369824	0.6460177	C ₁₄	NA	2
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 2021™	0.81299992	0.75221239	C₁₀	NA	1
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 2021™	0.26698434	0.38053097	C₁₀	NA	1
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 2021™	0.36102049	0.46902655	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 2021™	0.82418296	0.7699115	C ₁₂	NA	1
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 2021™	0.29301188	0.39823009	C ₈	NA	1
Dodecilbencenosulfonato de sodio	SMA 2021™	0.91587432	0.82300885	C ₁₂	NA	1
nDDDTP D342	SMA 2021™	0.91122883	0.80530973	C ₁₂	NA	1
nDDTGP D323	SMA 2021™	0.45133615	0.53982301	C₁₀	NA	1
nDDTP D335	SMA 2021™	0.51566509	0.57522124	C₁₀	NA	1
Ninate 411™	SMA 2021™	0.7719462	0.69911504	C ₁₂	NA	1
nNDTP N335	SMA 2021™	0.39107611	0.48672566	C ₉	NA	1
OEGMDE 0330	SMA 2021™	1.29520205	0.96460177	C ₁₂	NA	1
Poli-10-laurato	SMA 2021™	1.08248266	0.87610619	C ₁₂	NA	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
Poli-10-oleato	SMA 2021™	1.09001173	0.89380531	C ₁₈	NA	1
Poli-10-palmitato	SMA 2021™	0.16112024	0.23893805	C ₁₆	NA	1
Poli-10-estearato	SMA 2021™	0.16325242	0.25663717	C ₁₈	NA	1
Span 20™	SMA 2021™	0.24952947	0.34513274	C ₁₂	NA	1
Stepan Mild L3™	SMA 2021™	0.52137185	0.61061947	C ₁₂	NA	1
Stepan SLI FB™	SMA 2021™	0.77624393	0.71681416	C ₁₂	NA	1
Stepan sulfonic acid™	SMA 2021™	0.51778871	0.59292035	C ₁₂	S	1
TC Lab 35	SMA 2021™	0.59035451	0.66371681	C ₁₂	NA	1
Triton X-100™	SMA 2021™	0.41340161	0.50442478	C ₈	S	1
Triton X-305™	SMA 2021™	0.13348571	0.20353982	C ₈	S	1
Triton X-45™	SMA 2021™	0.54179759	0.62831858	C ₈	S	1
Tween 40™	SMA 2021™	0.31191032	0.4159292	C ₁₆	NA	1
Tween 60™	SMA 2021™	0.59247768	0.68141593	C ₁₈	NA	1
Tween 80™	SMA 2021™	1.05503229	0.85840708	C ₁₈	NA	1
Tween 85™	SMA 2021™	0.94429643	0.84070796	C ₁₆	NA	3
Amphosol 2CSF™	SMA 3000™	0.1489152	0.34545455	C ₁₈	NA	2
Ácido antraquinona-2-sulfónico	SMA 3000™	0.06904032	0.25454545	NA aromático	NA	0
Apo 10	SMA 3000™	0.39176322	0.58181818	C₁₀	NA	1
Apo 12	SMA 3000™	0.62620128	0.70909091	C ₁₂	NA	1
Glucósido de Coco	SMA 3000™	0.93381513	0.87272727	C ₁₈	NA	1
PFDMP0310F	SMA 3000™	0.00769877	0.2	C ₈	NA	1
Genapol X080	SMA 3000™	1.35561809	0.96363636	C ₁₃	S	1
HEGMDDE H370	SMA 3000™	0.93388926	0.89090909	C ₁₂	NA	1
HEGMDE H360	SMA 3000™	0.97713596	0.90909091	C₁₀	NA	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
HEGMOE H350	SMA 3000™	0.56612221	0.67272727	C ₈	NA	1
HXEGMDDE H375	SMA 3000™	1.02583227	0.94545455	C ₁₂	NA	1
Lakeland PAE 136™	SMA 3000™	0.64799652	0.72727273	C ₁₃	NA	1
Stepan Lathanol LAL™	SMA 3000™	0.13921714	0.30909091	C ₁₂	NA	1
MNAC ₁₂	SMA 3000™	0.34875182	0.52727273	C ₁₂	NA	2
MNAC ₁₃	SMA 3000™	0.32243256	0.49090909	C ₁₃	NA	2
MNAC ₁₄	SMA 3000™	0.2925184	0.47272727	C ₁₄	NA	2
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 3000™	0.382233	0.56363636	C ₁₀	NA	1
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 3000™	0.28167062	0.43636364	C ₁₀	NA	1
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 3000™	0.16597792	0.36363636	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 3000™	0.47669814	0.6	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 3000™	0.78408718	0.83636364	C ₁₂	NA	1
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 3000™	0.28058523	0.41818182	C ₈	NA	1
Dodecilbencenosulfonato de sodio	SMA 3000™	0.08967674	0.27272727	C ₁₂	NA	1
nDDTTP D342	SMA 3000™	0.66968033	0.74545455	C ₁₂	NA	1
nDDTGP D323	SMA 3000™	0.86331518	0.85454545	C ₁₀	NA	1
nDDTP D335	SMA 3000™	0.47780789	0.61818182	C ₁₀	NA	1
Ninate 411™	SMA 3000™	0.28448763	0.45454545	C ₁₂	NA	1
nNDTP N335	SMA 3000™	0.33141816	0.50909091	C ₉	NA	1
nODTTP 0320	SMA 3000™	0.05281838	0.23636364	C ₈	NA	1
OEGMDE 0330	SMA 3000™	0.99788957	0.92727273	C ₁₂	NA	1
Poli-10-laurato	SMA 3000™	0.70717371	0.78181818	C ₁₂	NA	1
Poli-10-oleato	SMA 3000™	0.20373552	0.38181818	C ₁₈	NA	1
Poli-10-palmitato	SMA 3000™	0.54474114	0.65454545	C ₁₆	NA	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
Poli-10-estearato	SMA 3000™	0.37308656	0.54545455	C ₁₈	NA	1
Span 20™	SMA 3000™	0.68594116	0.76363636	C ₁₂	NA	1
Stepan Mild L3™	SMA 3000™	0.48349829	0.63636364	C ₁₂	NA	1
Stepan SLI FB™	SMA 3000™	0.73250601	0.8	C ₁₂	NA	1
Stepan sulfonic acid™	SMA 3000™	0.23457864	0.4	C ₁₂	S	1
TC Lab 35	SMA 3000™	0.14866913	0.32727273	C ₁₂	NA	1
Triton X-100™	SMA 3000™	0.59926377	0.69090909	C ₈	S	1
Triton X-305™	SMA 3000™	0.13352979	0.29090909	C ₈	S	1
Triton X-45™	SMA 3000™	0.73537752	0.81818182	C ₈	S	1
Tween 65™	SMA 3000™	1.5270864	1	C ₁₈	NA	3
Tween 85™	SMA 3000™	1.49791049	0.98181818	C ₁₆	NA	3
AminGCK 30H	SMA-IBE	0.13080691	0.63636364	C ₁₈ , C ₈	NA	1, 1
Amphosol 2CSF™	SMA-IBE	0.04431075	0.37373737	C ₁₈	NA	2
Apo 10	SMA-IBE	0.13055103	0.61616162	C₁₀	NA	1
Apo 12	SMA-IBE	0.5294656	0.95959596	C ₁₂	NA	1
Stepan Bio Soft D-40™	SMA-IBE	0.06688198	0.45454545	NA- anillo de benceno C ₆	NA	0
Glucósido de Coco	SMA-IBE	0.20882744	0.75757576	C ₁₈	NA	1
Fluoro octil maltósido O310F	SMA-IBE	0.05203224	0.39393939	C ₈	NA	1
HEGMDDE H370	SMA-IBE	0.45706561	0.8989899	C ₁₂	NA	1
HEGMDE H360	SMA-IBE	0.51215139	0.93939394	C₁₀	NA	1
HXEGMDDE H375	SMA-IBE	0.82075754	0.97979798	C ₁₂	NA	1
Lakeland PAE 136™	SMA-IBE	0.13333097	0.65656566	C ₁₃	NA	1
MNAC ₁₄	SMA-IBE	0.18234299	0.6969697	C ₁₄	NA	2
n-Decanoil-L-Metionina	SMA-IBE	0.8743853	1	C₁₀	NA	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
n-Decanoil-L-Treonina	SMA-IBE	0.17561649	0.67676768	C ₁₀	NA	1
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA-IBE	0.09908736	0.51515152	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA-IBE	0.43202715	0.87878788	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA-IBE	0.09546425	0.49494949	C ₁₂	NA	1
n-Octanoil-L-Metionina	SMA-IBE	0.18338342	0.71717172	C ₈	NA	1
nDDDTp D342	SMA-IBE	0.21636181	0.7979798	C ₁₂	NA	1
nDDTGP D323	SMA-IBE	0.07330399	0.47474747	C ₁₀	NA	1
nDDTP D335	SMA-IBE	0.21277188	0.77777778	C ₁₀	NA	1
OEGMDE 0330	SMA-IBE	0.11103633	0.55555556	C ₁₂	NA	1
Poli-10-laurato	SMA-IBE	0.10433733	0.53535354	C ₁₂	NA	1
Poli-10-oleato	SMA-IBE	0.37458027	0.83838384	C ₁₈	NA	1
Span 20™	SMA-IBE	0.05593784	0.41414141	C ₁₂	NA	1
Stepan Mild L3™	SMA-IBE	0.37705681	0.85858586	C ₁₂	NA	1
Stepan SLL FB™	SMA-IBE	0.48079671	0.91919192	C ₁₂	NA	1
Stepan sulfonic acid™	SMA-IBE	0.1144461	0.57575758	C ₁₂	S	1
Triton X-305™	SMA-IBE	0.05866763	0.43434343	C ₈	S	1
Triton X-45™	SMA-IBE	0.30935824	0.81818182	C ₈	S	1
Tween 60™	SMA-IBE	0.03869585	0.35353535	C ₁₈	NA	1
Tween 65™	SMA-IBE	0.12881485	0.5959596	C ₁₈	NA	3
Tween 85™	SMA-IBE	0.20361205	0.73737374	C ₁₆	NA	3
1,2-Hexanodiol	SMA 725™	0.15337869	0.40740741	C ₆	NA	1
AminGCK 30H	SMA 725™	0.12788222	0.37037037	C ₁₈ , C ₈	NA	1,1
Amphosol 2CSF™	SMA 725™	0.0592602	0.24074074	C ₁₈	NA	2
Apo 10	SMA 725™	0.14177449	0.38888889	C ₁₀	NA	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
Apo 12	SMA 725™	0.1616708	0.44444444	C ₁₂	NA	1
Stepan Bio Soft D-40™	SMA 725™	0.47579589	0.77777778	NA- anillo de benceno C ₆	NA	0
Stepan Bio Terge AS-40™	SMA 725™	0.49735177	0.81481481	C ₁₄	NA	1
Ácido dodecano-l-sulfónico	SMA 725™	0.35107569	0.59259259	C ₁₂	NA	1
PFDMP-O310F	SMA 725™	0.06112487	0.25925926	C ₈	NA	1
Genapol X080	SMA 725™	1.10987513	1	C ₁₃	S	1
HEGMDDE H370	SMA 725™	0.40115456	0.68518519	C ₁₂	NA	1
HEGMDE H360	SMA 725™	0.93509538	0.98148148	C₁₀	NA	1
HXEGMDDE H375	SMA 725™	0.30848282	0.57407407	C ₁₂	NA	1
Lakeland PAE 136™	SMA 725™	0.39836812	0.66666667	C ₁₃	NA	1
Stepan Lathanol LAL™	SMA 725™	0.64861222	0.90740741	C ₁₂	NA	1
MNAC ₁₂	SMA 725™	0.10799358	0.33333333	C ₁₂	NA	2
MNAC ₁₄	SMA 725™	0.20121167	0.5	C ₁₄	NA	2
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 725™	0.55741713	0.83333333	C₁₀	NA	1
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 725™	0.1819542	0.46296296	C₁₀	NA	1
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 725™	0.15380139	0.42592593	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 725™	0.80065107	0.94444444	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 725™	0.6146695	0.87037037	C ₁₂	NA	1
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 725™	0.26170605	0.53703704	C ₈	NA	1
nDDDTp D342	SMA 725™	0.30132153	0.55555556	C ₁₂	NA	1
nDDTGP D323	SMA 725™	0.36140299	0.62962963	C₁₀	NA	1
nDDTP D335	SMA 725™	0.05901839	0.22222222	C₁₀	NA	1
Ninate 411™	SMA 725™	0.10077397	0.31481481	C ₁₂	NA	1
nNDTP N335	SMA 725™	0.07587077	0.27777778	C ₉	NA	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
OEGMDE 0330	SMA 725™	0.19608992	0.48148148	C ₁₂	NA	1
Poli-10-laurato	SMA 725™	0.36182575	0.64814815	C ₁₂	NA	1
Poli-10-oleato	SMA 725™	0.46410887	0.74074074	C ₁₈	NA	1
Poli-10-palmitato	SMA 725™	0.43191942	0.7037037	C ₁₆	NA	1
Poli-10-estearato	SMA 725™	0.20202389	0.51851852	C ₁₈	NA	1
Span 20™	SMA 725™	0.44580726	0.72222222	C ₁₂	NA	1
Stepan Mild L3™	SMA 725™	0.6374942	0.88888889	C ₁₂	NA	1
Stepan SLL FB™	SMA 725™	0.72343785	0.92592593	C ₁₂	NA	1
Triton X-100™	SMA 725™	0.48630719	0.7962963	C ₈	S	1
Triton X-305™	SMA 725™	0.11772017	0.35185185	C ₈	S	1
Triton X-45™	SMA 725™	0.5651288	0.85185185	C ₈	S	1
Tween 65™	SMA 725™	0.914446	0.96296296	C ₁₈	NA	3
Tween 80™	SMA 725™	0.47014245	0.75925926	C ₁₈	NA	1
VDISTILL DV53™	SMA 725™	0.35766349	0.61111111	C ₁₈ , C ₁₈	NA	11
AminGCK 30H	SMA Cumene	0.15815307	0.37037037	C ₁₈ , C ₈	NA	1, 1
Amphosol 2CSF™	SMA Cumene	0.08774462	0.22222222	C ₁₈	NA	2
Apo 10	SMA Cumene	0.34123615	0.59259259	C₁₀	NA	1
Apo 12	SMA Cumene	0.95262301	0.87037037	C ₁₂	NA	1
Glucósido de Coco	SMA Cumene	0.27572738	0.55555556	C ₁₈	NA	1
PFDMP O310F	SMA Cumene	0.37142484	0.61111111	C ₈	NA	1
Genapol X080	SMA Cumene	1.04137201	0.90740741	C ₁₃	S	1
HEGMDDE H370	SMA Cumene	1.09147006	0.94444444	C ₁₂	NA	1
HEGMDE H360	SMA Cumene	0.94397663	0.83333333	C₁₀	NA	1
HEGMOE H350	SMA Cumene	0.09265332	0.24074074	C ₈	NA	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
HXEGMDDE H375	SMA Cumene	1.22945181	0.98148148	C ₁₂	NA	1
Lakeland PAE 136™	SMA Cumene	0.94734632	0.85185185	C ₁₃	NA	1
MNAC ₁₂	SMA Cumene	0.20772105	0.42592593	C ₁₂	NA	2
MNAC ₁₃	SMA Cumene	0.21033641	0.46296296	C ₁₃	NA	2
MNAC ₁₄	SMA Cumene	0.1577351	0.35185185	C ₁₄	NA	2
n-Decanoil-L-Metionina	SMA Cumene	0.84450697	0.81481481	C ₁₀	NA	1
n-Decanoil-L-Treonina	SMA Cumene	0.23185822	0.51851852	C ₁₀	NA	1
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA Cumene	0.20789949	0.44444444	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA Cumene	0.6546941	0.72222222	C ₁₂	NA	1
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA Cumene	0.64879869	0.7037037	C ₁₂	NA	1
n-Octanoil-L-Metionina	SMA Cumene	0.37412274	0.62962963	C ₈	NA	1
Dodecylbencenosulfonato de sodio	SMA Cumene	0.09669148	0.27777778	C ₁₂	NA	1
nDDDTp D342	SMA Cumene	0.77326272	0.77777778	C ₁₂	NA	1
nDDTGP D323	SMA Cumene	1.05320893	0.92592593	C ₁₀	NA	1
nDDTP D335	SMA Cumene	0.17108907	0.40740741	C ₁₀	NA	1
nNDTP N335	SMA Cumene	0.16064457	0.38888889	C ₉	NA	1
OEGMDE 0330	SMA Cumene	1.18257782	0.96296296	C ₁₂	NA	1
Poli-10-laurato	SMA Cumene	0.42116849	0.64814815	C ₁₂	NA	1
Poli-10-oleato	SMA Cumene	0.80985223	0.7962963	C ₁₈	NA	1
Poli-10-estearato	SMA Cumene	0.26499802	0.53703704	C ₁₈	NA	1
Span 20™	SMA Cumene	0.65967059	0.74074074	C ₁₂	NA	1
Stepan Mild L3™	SMA Cumene	0.28149156	0.57407407	C ₁₂	NA	1
Stepan SLL FB™	SMA Cumene	1.0023824	0.88888889	C ₁₂	NA	1
Stepan sulfonic acid™	SMA Cumene	0.12070749	0.2962963	C ₁₂	S	1

Tabla 12B. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	AUC sigmoidea (puntuación de nanorred)	Puntaje específico de polímero	Longitud de la cadena alquilo	Cadena alquilo ramificada	Número de cadenas alquilo
TC Lab 35	SMA Cumene	0.21883052	0.48148148	C ₁₂	NA	1
Triton X-100™	SMA Cumene	0.66228879	0.75925926	C ₈	S	1
Triton X-305™	SMA Cumene	0.14128455	0.33333333	C ₈	S	1
Triton X-45™	SMA Cumene	1.36829352	1	C ₈	S	1
Tween 40™	SMA Cumene	0.09602644	0.25925926	C ₁₆	NA	1
Tween 65™	SMA Cumene	0.56141023	0.66666667	C ₁₈	NA	3
Tween 80™	SMA Cumene	0.13040442	0.31481481	C ₁₈	NA	1
Tween 85™	SMA Cumene	0.63570514	0.68518519	C ₁₆	NA	3

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
1,2-Hexanodiol	DIBMA	Aniónico	-1	S	N	0
Amphosol 2CSF™	DIBMA	Anfótero	1	N	S	0
Apo 10	DIBMA	No iónico	0	S	N	0
Apo 12	DIBMA	No iónico	0	S	N	0
Stepan Bio Soft D-40™	DIBMA	Aniónico	-1	S	S	0
Cedepal TD-403 MFLD™	DIBMA	Aniónico	-1	S	N	0
Glucósido de Coco	DIBMA	No iónico	0	N anillo C ₆	S	0
Ácido dodecano-1-sulfónico	DIBMA	Aniónico	-1	S	N	0
PFDMP O310F	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
Genapol X080	DIBMA	No iónico	0	S	N	0
HEGMDDE H370	DIBMA	No iónico	0	S	N	0
HEGMDE H360	DIBMA	No iónico	0	S	N	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
HEGMOEH350	DIBMA	No iónico	0	S	N	0
HXEGMDDE H375	DIBMA	No iónico	0	S	N	0
Lakeland PAE 136™	DIBMA	Aniónico	-1	S	N	0
Stepan Lathanol LAL™	DIBMA	Aniónico	-1	S	N	0
MNAC ₁₂	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
MNAC ₁₃	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
MNAC ₁₄	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
n-Decanoil-L-Metionina	DIBMA	Aniónico	-1	N	S	0
n-Decanoil-L-Treonina	DIBMA	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Histidina	DIBMA	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Metionina	DIBMA	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Treonina	DIBMA	Aniónico	-1	N	S	0
n-Octanoil-L-Metionina	DIBMA	Aniónico	-1	N	S	0
Dodecylbencenosulfonato de sodio	DIBMA	Aniónico	-1	N	S	0
nDDTTP D342	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
nDDTGP D323	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
nDDTP D335	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
Ninate 411™	DIBMA	Aniónico	-1	N	S	0
nnntp n335	DIBMA	No iónico	0	N	N	0
oegmde o330	DIBMA	No iónico	0	S	N	0
Poli-10-laurato	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
Poli-10-oleato	DIBMA	No iónico	0	N	S	1
Poli-10-estearato	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
Span 20™	DIBMA	No iónico	0	N	N	0
Stepan Mild L3™	DIBMA	Aniónico	-1	S	N	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
Stepan SLL FB™	DIBMA	Aniónico	-1	N	S	0
Stepan sulfonic acid™	DIBMA	Aniónico	-1	S	N	0
TC Lab 35	DIBMA	Anfótero	1	N	S	0
Triton X-100™	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
Triton X-305™	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
Triton X-45™	DIBMA	No iónico	0	N	S	0
Tween 20™	DIBMA	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 40™	DIBMA	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 60™	DIBMA	No iónico	0	N	S (4)	0
tween 65™	DIBMA	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 80™	DIBMA	No iónico	0	N	S (4)	1
Tween 85™	DIBMA	No iónico	0	N	S (4)	0
Sulfonato de 1-octano	SMA 2000™	Aniónico	-1	S	N	0
AminGCK 30H	SMA 2000™	Aniónico	-1	S	N	1
Amphosol 2CSF™	SMA 2000™	amphoteric	1	N	S	0
Apo 10	SMA 2000™	No iónico	0	S	N	0
Apo 12	SMA 2000™	No iónico	0	S	N	0
Stepan Bio Soft D-40™	SMA 2000™	Aniónico	-1	S	S	0
Stepan Bio Terge AS-40™	SMA 2000™	Aniónico	-1	S	N	1
Glucósido de Coco	SMA 2000™	No iónico	0	N anillo C ₆	S	0
Ácido dodecano-1-sulfónico	SMA 2000™	Aniónico	-1	S	N	0
PFDMP O310F	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
Genapol X080	SMA 2000™	No iónico	0	S	N	0
HEGMDDE H370	SMA 2000™	No iónico	0	S	N	0
HEGMDE H360	SMA 2000™	No iónico	0	S	N	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
HEGMOEH350	SMA 2000™	No iónico	0	S	N	0
HXEGMDDE H375	SMA 2000™	No iónico	0	S	N	0
Lakeland PAE 136™	SMA 2000™	Aniónico	-1	S	N	0
Stepan Lathanol LAL™	SMA 2000™	Aniónico	-1	S	N	0
MNAC ₁₃	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
MNAC ₁₄	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 2000™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 2000™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 2000™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 2000™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 2000™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 2000™	Aniónico	-1	N	S	0
Dodecylbencenosulfonato de sodio	SMA 2000™	Aniónico	-1	N	S	0
nDDTP D342	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
nDDTGP D323	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
nDDTP D335	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
Ninate 411™	SMA 2000™	Aniónico	-1	N	S	0
nNDTP N335	SMA 2000™	No iónico	0	N	N	0
OEGMDE 0330	SMA 2000™	No iónico	0	S	N	0
Poli-10-laurato	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
Poli-10-oleato	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	1
Poli-10-estearato	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
Span 20™	SMA 2000™	No iónico	0	N	N	0
Stepan Mild L3™	SMA 2000™	Aniónico	-1	S	N	0
Stepan SLL FB™	SMA 2000™	Aniónico	-1	N	S	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
Stepan sulfonic acid™	SMA 2000™	Aniónico	-1	S	N	0
TC Lab 35	SMA 2000™	Anfótero	1	N	S	0
Triton X-100™	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
Triton X-305™	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
Triton X-45™	SMA 2000™	No iónico	0	N	S	0
Tween 20™	SMA 2000™	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 40™	SMA 2000™	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 60™	SMA 2000™	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 65™	SMA 2000™	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 80™	SMA 2000™	No iónico	0	N	S (4)	1
Tween 85™	SMA 2000™	No iónico	0	N	S (4)	0
VDISTILL DV53™	SMA 2000™	No iónico	0	S	N	1, 3
VDISTILL DV63™	SMA 2000™	No iónico	0	S	N	1, 3
Sulfonato de 1 octano	SMA 2021™	Aniónico	-1	S	N	0
AminGCK 30H	SMA 2021™	Aniónico	-1	S	N	1
Amphosol 2CSF™	SMA 2021™	amphoteric	1	N	S	0
Ácido antraquinona-2-sulfónico	SMA 2021™	Aniónico	-1	S	S	0
Apo 10	SMA 2021™	No iónico	0	S	N	0
Apo 12	SMA 2021™	No iónico	0	S	N	0
Cedepal TD-403 MFLD™	SMA 2021™	Aniónico	-1	S	N	0
Glucósido de Coco	SMA 2021™	No iónico	0	N anillo C ₆	S	0
Ácido dodecano-1-sulfónico	SMA 2021™	Aniónico	-1	S	N	0
PFDMF O310F	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
Genapol X080	SMA 2021™	No iónico	0	S	N	0
HEGMDDE H370	SMA 2021™	No iónico	0	S	N	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
HEGMDE H360	SMA 2021™	No iónico	0	S	N	0
HEGMOE H350	SMA 2021™	No iónico	0	S	N	0
HXEGMDDE H375	SMA 2021™	No iónico	0	S	N	0
Lakeland PAE 136™	SMA 2021™	Aniónico	-1	S	N	0
Stepan Lathanol LAL™	SMA 2021™	Aniónico	-1	S	N	0
MNAC ₁₃	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
MNAC ₁₄	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 2021™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 2021™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 2021™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 2021™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 2021™	Aniónico	-1	N	S	0
Dodecylbencenosulfonato de sodio	SMA 2021™	Aniónico	-1	N	S	0
nDDTTP D342	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
nDDTGP D323	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
nDDTP D335	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
Ninate 411™	SMA 2021™	Aniónico	-1	N	S	0
nNDTP N335	SMA 2021™	No iónico	0	N	N	0
OEGMDE 0330	SMA 2021™	No iónico	0	S	N	0
Poli-10-laurato	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
Poli-10-oleato	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	1
Poli-10-palmitato	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
Poli-10-estearato	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
Span 20™	SMA 2021™	No iónico	0	N	N	0
Stepan Mild L3™	SMA 2021™	Aniónico	-1	S	N	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
Stepan SLL FB™	SMA 2021™	Aniónico	-1	N	S	0
Stepan sulfonic acid™	SMA 2021™	Aniónico	-1	S	N	0
TC Lab 35	SMA 2021™	Anfótero	1	N	S	0
Triton X-100™	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
Triton X-305™	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
Triton X-45™	SMA 2021™	No iónico	0	N	S	0
Tween 40™	SMA 2021™	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 60™	SMA 2021™	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 80™	SMA 2021™	No iónico	0	N	S (4)	1
Tween 85™	SMA 2021™	No iónico	0	N	S (4)	0
Amphosol 2CSF™	SMA 3000™	amphoteric	1	N	S	0
Ácido antraquinona-2-sulfónico	SMA 3000™	Aniónico	-1	S	S	0
Apo 10	SMA 3000™	No iónico	0	S	N	0
Apo 12	SMA 3000™	No iónico	0	S	N	0
Glucósido de Coco	SMA 3000™	No iónico	0	N anillo C ₆	S	0
PFDMP O310F	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
Genapol X080	SMA 3000™	No iónico	0	S	N	0
HEGMDDE H370	SMA 3000™	No iónico	0	S	N	0
HEGMDE H360	SMA 3000™	No iónico	0	S	N	0
HEGMOE H350	SMA 3000™	No iónico	0	S	N	0
HXEGMDDE H375	SMA 3000™	No iónico	0	S	N	0
Lakeland PAE 136™	SMA 3000™	Aniónico	-1	S	N	0
Stepan Lathanol LAL™	SMA 3000™	Aniónico	-1	S	N	0
MNAC ₁₂	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
MNAC ₁₃	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
MNAC ₁₄	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 3000™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 3000™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 3000™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 3000™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 3000™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 3000™	Aniónico	-1	N	S	0
Dodecylbencenosulfonato de sodio	SMA 3000™	Aniónico	-1	N	S	0
nDDDTP D342	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
nDDTGP D323	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
nDDTP D335	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
Ninate 411™	SMA 3000™	Aniónico	-1	N	S	0
nNDTP N335	SMA 3000™	No iónico	0	N	N	0
nODTTP 0320	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
OEGMDE 0330	SMA 3000™	No iónico	0	S	N	0
Poli-10-laurato	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
Poli-10-oleato	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	1
Poli-10-palmitato	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
Poli-10-estearato	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
Span 20™	SMA 3000™	No iónico	0	N	N	0
Stepan Mild L3™	SMA 3000™	Aniónico	-1	S	N	0
Stepan SLL FB™	SMA 3000™	Aniónico	-1	N	S	0
Stepan sulfonic acid™	SMA 3000™	Aniónico	-1	S	N	0
TC Lab 35	SMA 3000™	Anfótero	1	N	S	0
Triton X-100™	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
Triton X-305™	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
Triton X-45™	SMA 3000™	No iónico	0	N	S	0
Tween 65™	SMA 3000™	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 85™	SMA 3000™	No iónico	0	N	S (4)	0
AminGCK 30H	SMA-IBE	Aniónico	-1	S	N	1
Amphosol 2CSF™	SMA-IBE	amphoteric	1	N	S	0
Apo 10	SMA-IBE	No iónico	0	S	N	0
Apo 12	SMA-IBE	No iónico	0	S	N	0
Stepan Bio Soft D-40™	SMA-IBE	Aniónico	-1	S	S	0
Glucósido de Coco	SMA-IBE	No iónico	0	N anillo C ₆	S	0
Fluoro octil maltósido O310F	SMA-IBE	No iónico	0	N	S	0
HEGMDDE H370	SMA-IBE	No iónico	0	S	N	0
HEGMDE H360	SMA-IBE	No iónico	0	S	N	0
HXEGMDDE H375	SMA-IBE	No iónico	0	S	N	0
Lakeland PAE 136™	SMA-IBE	Aniónico	-1	S	N	0
MNAC ₁₄	SMA-IBE	No iónico	0	N	S	0
n-Decanoil-L-Metionina	SMA-IBE	Aniónico	-1	N	S	0
n-Decanoil-L-Treonina	SMA-IBE	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA-IBE	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA-IBE	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA-IBE	Aniónico	-1	N	S	0
n-Octanoil-L-Metionina	SMA-IBE	Aniónico	-1	N	S	0
nDDTP D342	SMA-IBE	No iónico	0	N	S	0
nDDTGP D323	SMA-IBE	No iónico	0	N	S	0
nDDTP D335	SMA-IBE	No iónico	0	N	S	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
OEGMDE 0330	SMA-IBE	No iónico	0	S	N	0
Poli-10-laurato	SMA-IBE	No iónico	0	N	S	0
Poli-10-oleato	SMA-IBE	No iónico	0	N	S	1
Span 20™	SMA-IBE	No iónico	0	N	N	0
Stepan Mild L3™	SMA-IBE	Aniónico	-1	S	N	0
Stepan SLL FB™	SMA-IBE	Aniónico	-1	N	S	0
Stepan sulfonic acid™	SMA-IBE	Aniónico	-1	S	N	0
Triton X-305™	SMA-IBE	No iónico	0	N	S	0
Triton X-45™	SMA-IBE	No iónico	0	N	S	0
Tween 60™	SMA-IBE	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 65™	SMA-IBE	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 85™	SMA-IBE	No iónico	0	N	S (4)	0
1,2-Hexanodiol	SMA 725™	Aniónico	-1	S	N	0
AminGCK 30H	SMA 725™	Aniónico	-1	S	N	1
Amphosol 2CSF™	SMA 725™	amphoteric	1	N	S	0
Apo 10	SMA 725™	No iónico	0	S	N	0
Apo 12	SMA 725™	No iónico	0	S	N	0
Stepan Bio Soft D-40™	SMA 725™	Aniónico	-1	S	S	0
Stepan Bio Terge AS-40™	SMA 725™	Aniónico	-1	S	N	1
Ácido dodecano-1-sulfónico	SMA 725™	Aniónico	-1	S	N	0
PFDMP-O310F	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
Genapol X080	SMA 725™	No iónico	0	S	N	0
HEGMDE H370	SMA 725™	No iónico	0	S	N	0
HEGMDE H360	SMA 725™	No iónico	0	S	N	0
HXEGMDDE H375	SMA 725™	No iónico	0	S	N	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
Lakeland PAE 136	SMA 725™	Aniónico	-1	S	N	0
Lathanol LAL™	SMA 725™	Aniónico	-1	S	N	0
MNAC ₁₂	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
MNAC ₁₄	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 725™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 725™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 725™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 725™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 725™	Aniónico	-1	N	S	0
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 725™	Aniónico	-1	N	S	0
nDDDTp D342	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
nDDTGP D323	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
nDDTP D335	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
Ninate 411™	SMA 725™	Aniónico	-1	N	S	0
nNDTP N335	SMA 725™	No iónico	0	N	N	0
OEGMDE 0330	SMA 725™	No iónico	0	S	N	0
Poli-10-laurato	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
Poli-10-oleato	SMA 725™	No iónico	0	N	S	1
Poli-10-palmitato	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
Poli-10-estearato	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
Span 20™	SMA 725™	No iónico	0	N	N	0
Stepan Mild L3™	SMA 725™	Aniónico	-1	S	N	0
Stepan SLL FB™	SMA 725™	Aniónico	-1	N	S	0
Triton X-100™	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
Triton X-305™	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0

Tabla 12C. Nanorredeas de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
Triton X-45™	SMA 725™	No iónico	0	N	S	0
Tween 65™	SMA 725™	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 80™	SMA 725™	No iónico	0	N	S (4)	1
VDISTILL DV53™	SMA 725™	No iónico	0	S	N	1, 3
AminGCK 30H	SMA Cumene	Aniónico	-1	S	N	1
Amphosol 2CSF™	SMA Cumene	amphoteric	1	N	S	0
Apo 10	SMA Cumene	No iónico	0	S	N	0
Apo 12	SMA Cumene	No iónico	0	S	N	0
Glucósido de Coco	SMA Cumene	No iónico	0	N anillo C ₆	Y	0
PFDMP-O310F	SMA Cumene	No iónico	0	N	Y	0
Genapol X080	SMA Cumene	No iónico	0	S	N	0
HEGMDDE H370	SMA Cumene	No iónico	0	S	N	0
HEGMDE H360	SMA Cumene	No iónico	0	S	N	0
HEGMOE H350	SMA Cumene	No iónico	0	S	N	0
HXEGMDDE H375	SMA Cumene	No iónico	0	S	N	0
Lakeland PAE 136™	SMA Cumene	Aniónico	-1	S	N	0
MNAC ₁₂	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
MNAC ₁₃	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
MNAC ₁₄	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
n-Decanoil-L-Metionina	SMA Cumene	Aniónico	-1	N	S	0
n-Decanoil-L-Treonina	SMA Cumene	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA Cumene	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA Cumene	Aniónico	-1	N	S	0
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA Cumene	Aniónico	-1	N	S	0
n-Octanoil-L-Metionina	SMA Cumene	Aniónico	-1	N	S	0

Tabla 12C. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Clase de tensioactivo	Puntaje	Grupo principal lineal	Grupo principal ramificado	DB
Dodecylbencenosulfonato de sodio	SMA Cumene	Aniónico	-1	N	S	0
nDDTP D342	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
nDDTGP D323	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
nDDTP D335	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
nNDTP N335	SMA Cumene	No iónico	0	N	N	0
OEGMDE 0330	SMA Cumene	No iónico	0	S	N	0
Poli-10-laurato	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
Poli-10-oleato	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	1
Poli-10-estearato	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
Span 20™	SMA Cumene	No iónico	0	N	N	0
Stepan Mild L3™	SMA Cumene	Aniónico	-1	S	N	0
Stepan SLL FB™	SMA Cumene	Aniónico	-1	N	S	0
Stepan sulfonic acid™	SMA Cumene	Aniónico	-1	S	N	0
TC Lab 35	SMA Cumene	Anfótero	1	N	S	0
Triton X-100™	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
Triton X-305™	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
Triton X-45™	SMA Cumene	No iónico	0	N	S	0
Tween 40™	SMA Cumene	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 65™	SMA Cumene	No iónico	0	N	S (4)	0
Tween 80™	SMA Cumene	No iónico	0	N	S (4)	1
Tween 85™	SMA Cumene	No iónico	0	N	S (4)	0

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
--------------	----------	-----------------	-----	----------	---------------------	-----

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
1,2-Hexanodiol	DIBMA	1,2-glicol	NA	NA	109.7	0.232
Amphosol 2CSF™	DIBMA	Dipropionato	NA	NA	7.808	0.315
Apo 10	DIBMA	Óxido de fosfina	NA	NA	5.835	0.259
Apo 12	DIBMA	Óxido de fosfina	NA	NA	82.41	0.272
Stepan Bio Soft D-40™	DIBMA	Sulfonato	NA	NA	5.13	0.322
Cedepal TD-403 MFLD™	DIBMA	Éter sulfato	NA	NA	6.421	0.235
Glucósido de Coco	DIBMA	Glucopiranosido	13.1	NA	27.32	0.154
Ácido dodecano-l-sulfónico	DIBMA	Sulfonato	NA	NA	5.108	0.227
PFDMP0310F	DIBMA	Azúcar maltósido	NA	NA	23.83	0.172
Genapol X080	DIBMA	Polietilenglicol	12	0.06-0.15	10.58	0.147
HEGMDDE H370	DIBMA	Etilenglicol	NA	0.069	8.218	0.14
HEGMDE H360	DIBMA	Etilenglicol	NA	0.9	6.033	0.158
HEGMOEH350	DIBMA	Etilenglicol	NA	10	5.505	0.25
HXEGMDDE H375	DIBMA	Etilenglicol	NA	NA	9.351	0.079
Lakeland PAE 136™	DIBMA	Éster de fosfato	NA	NA	7.924	0.161
Lathanol LAL™	DIBMA	Sulfoacetato	NA	NA	6.814	0.151
MNAC ₁₂	DIBMA	Glucopiranosido	NA	0.004	6.122	0.068
MNAC ₁₃	DIBMA	Glucopiranosido	NA	0.002	6.423	0.046
MNAC ₁₄	DIBMA	Manitol	NA	0.001	7.548	0.217
n-Decanoil-L-Metionina	DIBMA	Aminoácido	NA	NA	85.47	0.172
n-Decanoil-L-Treonina	DIBMA	Aminoácido	NA	NA	90.68	0.213
n-Dodecanoil-L-Histidina	DIBMA	Aminoácido	NA	NA	99.96	0.249
n-Dodecanoil -L-Metionina	DIBMA	Aminoácido	NA	NA	87.09	0.138
n-Dodecanoil-L-Treonina	DIBMA	Aminoácido	NA	NA	99.77	0.203
n-Octanoil-L-Metionina	DIBMA	Aminoácido	NA	NA	116.6	0.239

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
Dodecilbencenosulfonato de sodio	DIBMA	Sulfonato	NA	NA	4.235	0.53
nDDDTP D342	DIBMA	Tiomaltopiranosido	NA	0.05	11.67	0.131
nDDTGP D323	DIBMA	Tioglucopiranosido	NA	0.9	262.2	0.176
nDDTP D335	DIBMA	Tiomaltopiranosido	NA	0.9	6.881	0.078
Ninate 411™	DIBMA	Sulfonato	NA	1,214 mg/l	216.2	0.288
nNDTP N335	DIBMA	Tioglucopiranosido	NA	2.9	137	0.357
OEGMDEO330	DIBMA	Etilenglicol	NA	0.09	8.099	0.165
Poli-10-laurato	DIBMA	Éster de ácido graso de poliglicerol	12	NA	114.8	0.226
Poli-10-oleato	DIBMA	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	358	0.254
Poli-10-estearato	DIBMA	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	112.3	0.172
Span 20™	DIBMA	Sorbitán	NA	NA	1061	0.472
Stepan Mild L3™	DIBMA	Lactilato	NA	NA	372.9	0.067
Stepan SLL FB™	DIBMA	Lactilato	NA	NA	136.3	0.144
Stepan sulfonic acid™	DIBMA	Sulfonato	NA	NA	2.821	0.186
TC Lab 35	DIBMA	Acetato	13	NA	23.27	0.328
Triton X-100™	DIBMA	Etilenglicol	13.4	0.24	10.07	0.089
Triton X-305™	DIBMA	Etilenglicol	17.3	0.65	10.66	0.181
Triton X-45™	DIBMA	Etilenglicol	9.8	0.1	156.3	0.325
Tween 20™	DIBMA	Polisorbato	16.7	0.05	9.173	0.072
Tween 40™	DIBMA	Polisorbato	15.6	NA	9.691	0.079
Tween 60™	DIBMA	Polisorbato	14.9	0.022	134.2	0.637
tween 65™	DIBMA	Polisorbato	15.9	NA	114.5	0.286
Tween 80™	DIBMA	Polisorbato	15	0.012	10.42	0.026

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
Tween 85™	DIBMA	Polisorbato	NA	NA	189.8	0.252
Sulfonato de 1-octano	SMA 2000™	Sulfonato	NA	NA	1.562	0.367
AminGCK 30H	SMA 2000™	Glicinato de acilo	NA	NA	7.286	0.3
Amphosol 2CSF™	SMA 2000™	Dipropionato	NA	NA	7.808	0.315
Apo 10	SMA 2000™	Óxido de fosfina	NA	NA	5.835	0.259
Apo 12	SMA 2000™	Óxido de fosfina	NA	NA	82.41	0.272
Stepan Bio Soft D-40™	SMA 2000™	Sulfonato	NA	NA	5.13	0.322
Stepan Bio Terge AS-40™	SMA 2000™	Sulfonato	NA	NA	6.434	0.181
Glucósido de Coco	SMA 2000™	Glucopiranosido	13.1	NA	27.32	0.154
Ácido dodecano-1-sulfónico	SMA 2000™	Sulfonato	NA	NA	5.108	0.227
PFDMP-O310F	SMA 2000™	Azúcar maltósido	NA	NA	23.83	0.172
Genapol X080	SMA 2000™	Polietilenglicol	12	0.06-0.15	10.58	0.147
HEGMDDE H370	SMA 2000™	Etilenglicol	NA	0.069	8.218	0.14
HEGMDE H360	SMA 2000™	Etilenglicol	NA	0.9	6.033	0.158
HEGMOEH350	SMA 2000™	Etilenglicol	NA	10	5.505	0.25
HXEGMDDE H375	SMA 2000™	Etilenglicol	NA	NA	9.351	0.079
Lakeland PAE 136™	SMA 2000™	Éster de fosfato	NA	NA	7.924	0.161
Stepan Lathanol LAL™	SMA 2000™	Sulfoacetato	NA	NA	6.814	0.151
MNAC ₁₃	SMA 2000™	Glucopiranosido	NA	0.002	6.423	0.046
MNAC ₁₄	SMA 2000™	Manitol	NA	0.001	7.548	0.217
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 2000™	Aminoácido	NA	NA	85.47	0.172
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 2000™	Aminoácido	NA	NA	90.68	0.213
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 2000™	Aminoácido	NA	NA	99.96	0.249
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 2000™	Aminoácido	NA	NA	87.09	0.138
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 2000™	Aminoácido	NA	NA	99.77	0.203

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 2000™	Aminoácido	NA	NA	116.6	0.239
Dodecilbencenosulfonato de sodio	SMA 2000™	Sulfonato	NA	NA	4.235	0.53
nDDDTP D342	SMA 2000™	Tiomaltopiranosido	NA	0.05	11.67	0.131
nDDTGP D323	SMA 2000™	Tioglucopiranosido	NA	0.9	262.2	0.176
nDDTP D335	SMA 2000™	Tiomaltopiranosido	NA	0.9	6.881	0.078
Ninate 411™	SMA 2000™	Sulfonato	NA	1,214 mg/l	216.2	0.288
nNDTP N335	SMA 2000™	Tioglucopiranosido	NA	2.9	137	0.357
OEGMDE 0330	SMA 2000™	Etilenglicol	NA	0.09	8.099	0.165
Poli-10-laurato	SMA 2000™	Éster de ácido graso de poliglicerol	12	NA	114.8	0.226
Poli-10-oleato	SMA 2000™	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	358	0.254
Poli-10-estearato	SMA 2000™	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	112.3	0.172
Span 20™	SMA 2000™	Sorbitán	NA	NA	1061	0.472
Stepan Mild L3™	SMA 2000™	Lactilato	NA	NA	372.9	0.067
Stepan SLL FB™	SMA 2000™	Lactilato	NA	NA	136.3	0.144
Stepan sulfonic acid™	SMA 2000™	Sulfonato	NA	NA	2.821	0.186
TC Lab 35	SMA 2000™	Acetato	13	NA	23.27	0.328
Triton X-100™	SMA 2000™	Etilenglicol	13.4	0.24	10.07	0.089
Triton X-305™	SMA 2000™	Etilenglicol	17.3	0.65	10.66	0.181
Triton X-45™	SMA 2000™	Etilenglicol	9.8	0.1	156.3	0.325
Tween 20™	SMA 2000™	Polisorbato	16.7	0.05	9.173	0.072
Tween 40™	SMA 2000™	Polisorbato	15.6	NA	9.691	0.079
Tween 60™	SMA 2000™	Polisorbato	14.9	0.022	134.2	0.637
Tween 65™	SMA 2000™	Polisorbato	10.5	NA	114.5	0.286

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
Tween 80™	SMA 2000™	Polisorbato	15	0.012	10.42	0.026
Tween 85™	SMA 2000™	Polisorbato	11	NA	189.8	0.252
VDISTILL DV53™	SMA 2000™	Ácido graso	NA	NA	NA	NA
VDISTILL DV63™	SMA 2000™	Ácido graso	NA	NA	NA	NA
Sulfonato de 1 octano	SMA 2021™	Sulfonato	NA	NA	1.562	0.367
AminGCK 30H	SMA 2021™	Glicinato de acilo	NA	NA	7.286	0.3
Amphosol 2CSF	SMA 2021™	Dipropionato	NA	NA	7.808	0.315
Ácido antraquinona-2-sulfónico	SMA 2021™	Sulfonato	NA	NA	1.008	0.343
Apo 10	SMA 2021™	Óxido de fosfina	NA	NA	5.835	0.259
Apo 12	SMA 2021™	Óxido de fosfina	NA	NA	82.41	0.272
Cedepal TD-403 MFLD™	SMA 2021™	Éter sulfato	NA	NA	6.421	0.235
Glucósido de Coco	SMA 2021™	Glucopiranosido	13.1	NA	27.32	0.154
Ácido dodecano-1-sulfónico	SMA 2021™	Sulfonato	NA	NA	5.108	0.227
PFDMP-O310F	SMA 2021™	Azúcar maltósido	NA	NA	23.83	0.172
Genapol X080	SMA 2021™	Polietilenglicol	12	0.06-0.15	10.58	0.147
HEGMDDE H370	SMA 2021™	Etilenglicol	NA	0.069	8.218	0.14
HEGMDE H360	SMA 2021™	Etilenglicol	NA	0.9	6.033	0.158
HEGMOE H350	SMA 2021™	Etilenglicol	NA	10	5.505	0.25
HXEGMDDE H375	SMA 2021™	Etilenglicol	NA	NA	9.351	0.079
Lakeland PAE 136™	SMA 2021™	Éster de fosfato	NA	NA	7.924	0.161
Lathanol LAL™	SMA 2021™	Sulfoacetato	NA	NA	6.814	0.151
MNAC ₁₃	SMA 2021™	Glucopiranosido	NA	0.002	6.423	0.046
MNAC ₁₄	SMA 2021™	Manitol	NA	0.001	7.548	0.217
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 2021™	Aminoácido	NA	NA	85.47	0.172
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 2021™	Aminoácido	NA	NA	90.68	0.213

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 2021™	Aminoácido	NA	NA	87.09	0.138
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 2021™	Aminoácido	NA	NA	99.77	0.203
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 2021™	Aminoácido	NA	NA	116.6	0.239
Dodecilbencenosulfonato de sodio	SMA 2021™	Sulfonato	NA	NA	4.235	0.53
nDDDTP D342	SMA 2021™	Tiomaltopiranosido	NA	0.05	11.67	0.131
nDDTGP D323	SMA 2021™	Tioglucopiranosido	NA	0.9	262.2	0.176
nDDTP D335	SMA 2021™	Tiomaltopiranosido	NA	0.9	6.881	0.078
Ninate 411™	SMA 2021™	Sulfonato	NA	1,214 mg/l	216.2	0.288
nNDTP N335	SMA 2021™	Tioglucopiranosido	NA	2.9	137	0.357
OEGMDE 0330	SMA 2021™	Etilenglicol	NA	0.09	8.099	0.165
Poli-10-laurato	SMA 2021™	Éster de ácido graso de poliglicerol	12	NA	114.8	0.226
Poli-10-oleato	SMA 2021™	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	358	0.254
Poli-10-palmitato	SMA 2021™	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	111.8	0.226
Poli-10-estearato	SMA 2021™	Éster de ácido graso de poliglicerol	NA	NA	112.3	0.172
Span 20™	SMA 2021™	Sorbitán	NA	NA	1061	0.472
Stepan Mild L3™	SMA 2021™	Lactilato	NA	NA	372.9	0.067
Stepan SLL FB™	SMA 2021™	Lactilato	NA	NA	136.3	0.144
Stepan sulfonic acid™	SMA 2021™	Sulfonato	NA	NA	2.821	0.186
TC Lab 35	SMA 2021™	Acetato	13	NA	23.27	0.328
Triton X-100™	SMA 2021™	Etilenglicol	13.4	0.24	10.07	0.089
Triton X-305™	SMA 2021™	Etilenglicol	17.3	0.65	10.66	0.181
Triton X-45™	SMA 2021™	Etilenglicol	9.8	0.1	156.3	0.325

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
Tween 40™	SMA 2021™	Polisorbato	15.6	NA	9.691	0.079
Tween 60™	SMA 2021™	Polisorbato	14.9	0.022	134.2	0.637
Tween 80™	SMA 2021™	Polisorbato	15	0.012	10.42	0.026
Tween 85™	SMA 2021™	Polisorbato	11	NA	189.8	0.252
Amphosol 2CSF™	SMA 3000™	Dipropionato	NA	NA	7.808	0.315
Ácido antraquinona-2-sulfónico	SMA 3000™	Sulfonato	NA	NA	1.008	0.343
Apo 10	SMA 3000™	Óxido de fosfina	NA	NA	5.835	0.259
Apo 12	SMA 3000™	Óxido de fosfina	NA	NA	82.41	0.272
Glucósido de Coco	SMA 3000™	Glucopiranosido	13.1	NA	27.32	0.154
PFDMP-O310F	SMA 3000™	Azúcar maltósido	NA	NA	23.83	0.172
Genapol X080	SMA 3000™	Polietilenglicol	12	0.06-0.15	10.58	0.147
HEGMDDE H370	SMA 3000™	Etilenglicol	NA	0.069	8.218	0.14
HEGMDE H360	SMA 3000™	Etilenglicol	NA	0.9	6.033	0.158
HEGMOE H350	SMA 3000™	Etilenglicol	NA	10	5.505	0.25
HXEGMDDE H375	SMA 3000™	Etilenglicol	NA	NA	9.351	0.079
Lakeland PAE 136™	SMA 3000™	Éster de fosfato	NA	NA	7.924	0.161
Lathanol LAL™	SMA 3000™	Sulfoacetato	NA	NA	6.814	0.151
MNAC ₁₂	SMA 3000™	Glucopiranosido	NA	0.004	6.122	0.068
MNAC ₁₃	SMA 3000™	Glucopiranosido	NA	0.002	6.423	0.046
MNAC ₁₄	SMA 3000™	Manitol	NA	0.001	7.548	0.217
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 3000™	Aminoácido	NA	NA	85.47	0.172
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 3000™	Aminoácido	NA	NA	90.68	0.213
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 3000™	Aminoácido	NA	NA	99.96	0.249
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 3000™	Aminoácido	NA	NA	87.09	0.138
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 3000™	Aminoácido	NA	NA	99.77	0.203

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 3000™	Aminoácido	NA	NA	116.6	0.239
Dodecylbencenosulfonato de sodio	SMA 3000™	Sulfonato	NA	NA	4.235	0.53
nDDDTP D342	SMA 3000™	Tiomaltopiranosido	NA	0.05	11.67	0.131
nDDTGP D323	SMA 3000™	Tioglucopiranosido	NA	0.9	262.2	0.176
nDDTP D335	SMA 3000™	Tiomaltopiranosido	NA	0.9	6.881	0.078
Ninate 411™	SMA 3000™	Sulfonato	NA	1,214 mg/l	216.2	0.288
nNDTP N335	SMA 3000™	Tioglucopiranosido	NA	2.9	137	0.357
nODTTP 0320	SMA 3000™	Tiomaltopiranosido	NA	8.5	6.022	0.324
OEGMDE 0330	SMA 3000™	Etilenglicol	NA	0.09	8.099	0.165
Poli-10-laurato	SMA 3000™	Éster de ácido graso de poliglicerol	12	NA	114.8	0.226
Poli-10-oleato	SMA 3000™	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	358	0.254
Poli-10-palmitato	SMA 3000™	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	111.8	0.226
Poli-10-estearato	SMA 3000™	Éster de ácido graso de poliglicerol	11	NA	112.3	0.172
Span 20™	SMA 3000™	Sorbitán	NA	NA	1061	0.472
Stepan Mild L3™	SMA 3000™	Lactilato	NA	NA	372.9	0.067
Stepan SLL FB™	SMA 3000™	Lactilato	NA	NA	136.3	0.144
Stepan sulfonic acid™	SMA 3000™	Sulfonato	NA	NA	2.821	0.186
TC Lab 35	SMA 3000™	Acetato	13	NA	23.27	0.328
Triton X-100™	SMA 3000™	Etilenglicol	13.4	0.24	10.07	0.089
Triton X-305™	SMA 3000™	Etilenglicol	17.3	0.65	10.66	0.181
Triton X-45™	SMA 3000™	Etilenglicol	9.8	0.1	156.3	0.325
Tween 65™	SMA 3000™	Polisorbato	10.5	NA	114.5	0.286

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
Tween 85™	SMA 3000™	Polisorbato	11	NA	189.8	0.252
AminGCK 30H	SMA-IBE	Glicinato de acilo	NA	NA	7.286	0.3
Amphosol 2CSF™	SMA-IBE	Dipropionato	NA	NA	7.808	0.315
Apo 10	SMA-IBE	Óxido de fosfina	NA	NA	5.835	0.259
Apo 12	SMA-IBE	Óxido de fosfina	NA	NA	82.41	0.272
Stepan Bio Soft D-40™	SMA-IBE	Sulfonato	NA	NA	5.13	0.322
Glucósido de Coco	SMA-IBE	Glucopiranosido	13.1	NA	27.32	0.154
Fluoro octil maltósido O310F	SMA-IBE	Azúcar maltósido	NA	NA	23.83	0.172
HEGMDDE H370	SMA-IBE	Etilenglicol	NA	0.069	8.218	0.14
HEGMDE H360	SMA-IBE	Etilenglicol	NA	0.9	6.033	0.158
HXEGMDDE H375	SMA-IBE	Etilenglicol	NA	NA	9.351	0.079
Lakeland PAE 136™	SMA-IBE	Éster de fosfato	NA	NA	7.924	0.161
MNAC ₁₄	SMA-IBE	Manitol	NA	0.001	7.548	0.217
n-Decanoil-L-Metionina	SMA-IBE	Aminoácido	NA	NA	85.47	0.172
n-Decanoil-L-Treonina	SMA-IBE	Aminoácido	NA	NA	90.68	0.213
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA-IBE	Aminoácido	NA	NA	99.96	0.249
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA-IBE	Aminoácido	NA	NA	87.09	0.138
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA-IBE	Aminoácido	NA	NA	99.77	0.203
n-Octanoil-L-Metionina	SMA-IBE	Aminoácido	NA	NA	116.6	0.239
nDDDTP D342	SMA-IBE	Tiomaltopiranosido	NA	0.05	11.67	0.131
nDDTGP D323	SMA-IBE	Tioglucopeiranosido	NA	0.9	262.2	0.176
nDDTP D335	SMA-IBE	Tiomaltopiranosido	NA	0.9	6.881	0.078
OEGMDE 0330	SMA-IBE	Etilenglicol	NA	0.09	8.099	0.165
Poli-10-laurato	SMA-IBE	Éster de ácido graso de poliglicerol	12	NA	114.8	0.226

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
Poli-10-oleato	SMA-IBE	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	358	0.254
Span 20™	SMA-IBE	Sorbitán	NA	NA	1061	0.472
Stepan Mild L3™	SMA-IBE	Lactilato	NA	NA	372.9	0.067
Stepan SLL FB™	SMA-IBE	Lactilato	NA	NA	136.3	0.144
Stepan sulfonic acid™	SMA-IBE	Sulfonato	NA	NA	2.821	0.186
Triton X-305™	SMA-IBE	Etilenglicol	17.3	0.65	10.66	0.181
Triton X-45™	SMA-IBE	Etilenglicol	9.8	0.1	156.3	0.325
Tween 60™	SMA-IBE	Polisorbato	14.9	0.022	134.2	0.637
Tween 65™	SMA-IBE	Polisorbato	10.5	NA	114.5	0.286
Tween 85™	SMA-IBE	Polisorbato	11	NA	189.8	0.252
1,2-Hexanodiol	SMA 725™	1,2-glicol	NA	NA	109.7	0.232
AminGCK 30H	SMA 725™	Glicinato de acilo	NA	NA	7.286	0.3
Amphosol 2CSF™	SMA 725™	Dipropionato	NA	NA	7.808	0.315
Apo 10	SMA 725™	Óxido de fosfina	NA	NA	5.835	0.259
Apo 12	SMA 725™	Óxido de fosfina	NA	NA	82.41	0.272
Stepan Bio Soft D-40™	SMA 725™	Sulfonato	NA	NA	5.13	0.322
Stepan Bio Terge AS-40™	SMA 725™	Sulfonato	NA	NA	6.434	0.181
Ácido dodecano-1-sulfónico	SMA 725™	Sulfonato	NA	NA	5.108	0.227
PFDMP-O310F	SMA 725™	Azúcar maltósido	NA	NA	23.83	0.172
Genapol X080	SMA 725™	Polietilenglicol	12	0.06-0.15	10.58	0.147
HEGMDDE H370	SMA 725™	Etilenglicol	NA	0.069	8.218	0.14
HEGMDE H360	SMA 725™	Etilenglicol	NA	0.9	6.033	0.158
HXEGMDDE H375	SMA 725™	Etilenglicol	NA	NA	9.351	0.079
Lakeland PAE 136	SMA 725™	Éster de fosfato	NA	NA	7.924	0.161

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
Stepan Lathanol LAL™	SMA 725™	Sulfoacetato	NA	NA	6.814	0.151
MNAC ₁₂	SMA 725™	Glucopiranosido	NA	0.004	6.122	0.068
MNAC ₁₄	SMA 725™	Manitol	NA	0.001	7.548	0.217
n-Decanoil-L-Metionina	SMA 725™	Aminoácido	NA	NA	85.47	0.172
n-Decanoil-L-Treonina	SMA 725™	Aminoácido	NA	NA	90.68	0.213
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA 725™	Aminoácido	NA	NA	99.96	0.249
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA 725™	Aminoácido	NA	NA	87.09	0.138
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA 725™	Aminoácido	NA	NA	99.77	0.203
n-Octanoil-L-Metionina	SMA 725™	Aminoácido	NA	NA	116.6	0.239
nDDDTP D342	SMA 725™	Tiomaltopiranosido	NA	0.05	11.67	0.131
nDDTGP D323	SMA 725™	Tioglucopiranosido	NA	0.9	262.2	0.176
nDDTP D335	SMA 725™	Tiomaltopiranosido	NA	0.9	6.881	0.078
Ninate 411™	SMA 725™	Sulfonato	NA	1,214 mg/l	216.2	0.288
nNDTP N335	SMA 725™	Tioglucopiranosido	NA	2.9	137	0.357
OEGMDE 0330	SMA 725™	Etilenglicol	NA	0.09	8.099	0.165
Poli-10-laurato	SMA 725™	Éster de ácido graso de poliglicerol	12	NA	114.8	0.226
Poli-10-oleato	SMA 725™	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	358	0.254
Poli-10-palmitato	SMA 725™	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	111.8	0.226
Poli-10-estearato	SMA 725™	Éster de ácido graso de poliglicerol	11	NA	112.3	0.172
Span 20™	SMA 725™	Sorbitán	8.6	NA	1061	0.472
Stepan Mild L3™	SMA 725™	Lactilato	NA	NA	372.9	0.067
Stepan SLL FB™	SMA 725™	Lactilato	NA	NA	136.3	0.144

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
Triton X-100™	SMA 725™	Etilenglicol	13.4	0.24	10.07	0.089
Triton X-305™	SMA 725™	Etilenglicol	17.3	0.65	10.66	0.181
Triton X-45™	SMA 725™	Etilenglicol	9.8	0.1	156.3	0.325
Tween 65™	SMA 725™	Polisorbato	10	NA	114.5	0.286
Tween 80™	SMA 725™	Polisorbato	15	0.012	10.42	0.026
VDISTILL DV53™	SMA 725™	Ácido graso	NA	NA	NA	NA
AminGCK 30H	SMA Cumene	Glicinato de acilo	NA	NA	7.286	0.3
Amphosol 2CSF™	SMA Cumene	Dipropionato	NA	NA	7.808	0.315
Apo 10	SMA Cumene	Óxido de fosfina	NA	NA	5.835	0.259
Apo 12	SMA Cumene	Óxido de fosfina	NA	NA	82.41	0.272
Glucósido de Coco	SMA Cumene	Glucopiranosido	13.1	NA	27.32	0.154
PFDMP-O310F	SMA Cumene	Azúcar maltósido	NA	NA	23.83	0.172
Genapol X080	SMA Cumene	Polietilenglicol	12	0.06-0.15	10.58	0.147
HEGMDDE H370	SMA Cumene	Etilenglicol	NA	0.069	8.218	0.14
HEGMDE H360	SMA Cumene	Etilenglicol	NA	0.9	6.033	0.158
HEGMOE H350	SMA Cumene	Etilenglicol	NA	10	5.505	0.25
HXEGMDDE H375	SMA Cumene	Etilenglicol	NA	NA	9.351	0.079
Lakeland PAE 136™	SMA Cumene	Éster de fosfato	NA	NA	7.924	0.161
MNAC ₁₂	SMA Cumene	Glucopiranosido	NA	0.004	6.122	0.068
MNAC ₁₃	SMA Cumene	Glucopiranosido	NA	0.002	6.423	0.046
MNAC ₁₄	SMA Cumene	Manitol	NA	0.001	7.548	0.217
n-Decanoil-L-Metionina	SMA Cumene	Aminoácido	NA	NA	85.47	0.172
n-Decanoil-L-Treonina	SMA Cumene	Aminoácido	NA	NA	90.68	0.213
n-Dodecanoil-L-Histidina	SMA Cumene	Aminoácido	NA	NA	99.96	0.249
n-Dodecanoil-L-Metionina	SMA Cumene	Aminoácido	NA	NA	87.09	0.138

Tabla 12D. Nanorredes de Puntuación Positiva

Tensioactivo	Polímero	Grupo principal	HLB	CMC [mM]	Tamaño de la micela	PDI
n-Dodecanoil-L-Treonina	SMA Cumene	Aminoácido	NA	NA	99.77	0.203
n-Octanoil-L-Metionina	SMA Cumene	Aminoácido	NA	NA	116.6	0.239
Dodecilbencenosulfonato de sodio	SMA Cumene	Sulfonato	NA	NA	4.235	0.53
nDDDTP D342	SMA Cumene	Tiomaltopiranosido	NA	0.05	11.67	0.131
nDDTGP D323	SMA Cumene	Tioglucopiranosido	NA	0.9	262.2	0.176
nDDTP D335	SMA Cumene	Tiomaltopiranosido	NA	0.9	6.881	0.078
nNDTP N335	SMA Cumene	Tioglucopiranosido	NA	2.9	137	0.357
OEGMDE 0330	SMA Cumene	Etilenglicol	NA	0.09	8.099	0.165
Poli-10-laurato	SMA Cumene	Éster de ácido graso de poliglicerol	12	NA	114.8	0.226
Poli-10-oleato	SMA Cumene	Éster de ácido graso de poliglicerol	10.5	NA	358	0.254
Poli-10-estearato	SMA Cumene	Éster de ácido graso de poliglicerol	11	NA	112.3	0.172
Span 20™	SMA Cumene	Sorbitán	NA	NA	1061	0.472
Stepan Mild L3™	SMA Cumene	Lactilato	NA	NA	372.9	0.067
Stepan SLL FB™	SMA Cumene	Lactilato	NA	NA	136.3	0.144
Stepan sulfonic acid™	SMA Cumene	Sulfonato	NA	NA	2.821	0.186
TC Lab 35	SMA Cumene	Acetato	13	NA	23.27	0.328
Triton X-100™	SMA Cumene	Etilenglicol	13.4	0.24	10.07	0.089
Triton X-305™	SMA Cumene	Etilenglicol	17.3	0.65	10.66	0.181
Triton X-45™	SMA Cumene	Etilenglicol	9.8	0.1	156.3	0.325
Tween 40™	SMA Cumene	Polisorbato	15.6	NA	9.691	0.079
Tween 65™	SMA Cumene	Polisorbato	15.9	NA	114.5	0.286
Tween 80™	SMA Cumene	Polisorbato	10.5	0.012	10.42	0.026
Tween 85™	SMA Cumene	Polisorbato	11	NA	189.8	0.252

Tabla 13. Combinaciones de Tensioactivos No Iónicos y Polímeros que no Formaron una Respuesta de Nanorred en los Ensayos de Valoración (No se Detectó Sigmoide)

Tensoactivo	N° de Carbonos de la Cadena Alquilo	Polímero	Diámetro Medio del Polímero [nm]	Diámetro Teórico del Polímero	Grupo Principal	Diámetro del Agregado de tensioactivo [nm]	Índice de Polidispersidad (PDI)
Glucósido de Coco	18	SMA 725™	15.03	6.8	Glucopiranosido	27.32	0.154
HEGMOE H350	8	SMA 725™	15.03	6.8	Etilenglicol	5.505	0.25
MNAC ₁₃	13	SMA 725™	15.03	6.8	Glucopiranosido	6.423	0.046
nHDTP H301	7	SMA 725™	15.03	6.8	Tioglucopeiranosido	8.935	0.011
nODTTP 0320	8	SMA 725™	15.03	6.8	Tiomaltopiranosido	6.022	0.324
Tween 20™	12	SMA 725™	15.03	6.8	Polisorbato	9.173	0.072
Tween 40™	16	SMA 725™	15.03	6.8	Polisorbato	9.691	0.079
Tween 60™	18	SMA 725™	15.03	6.8	Polisorbato	134.2	0.637
Tween 85™	16	SMA 725™	15.03	6.8	Polisorbato	189.8	0.252
Vdistill DV63™	8, 18	SMA 725™	15.03	6.8	Ácido graso	NA	NA
MNAC ₁₂	12	SMA 2000™	5.242	2.6	Glucopiranosido	6.122	0.068
nHDTP H301	7	SMA 2000™	5.242	2.6	Tioglucopeiranosido	8.935	0.011
nODTTP 0320	8	SMA 2000™	5.242	2.6	Tiomaltopiranosido	6.022	0.324
Poli-10-palmitato	16	SMA 2000™	5.242	2.6	Éster de ácido graso de poliglicerol	111.8	0.226
nHDTP H301	7	DIBMA	92.7	3.2	Tioglucopeiranosido	8.935	0.011
nODTTP 0320	8	DIBMA	92.7	3.2	Tiomaltopiranosido	6.022	0.324
Poli-10-palmitato	16	DIBMA	92.7	3.2	Éster de ácido graso de poliglicerol	111.8	0.226
Vdistill DV53™	18,18	DIBMA	92.7	3.2	Ácido graso	NA	NA
Vdistill DV63™	18,18	DIBMA	92.7	3.2	Ácido graso	NA	NA
MNAC ₁₂	12	SMA 2021™	6.627	3.7	Glucopiranosido	6.122	0.068

Tabla 13. Combinaciones de Tensioactivos No Iónicos y Polímeros que no Formaron una Respuesta de Nanorred en los Ensayos de Valoración (No se Detectó Sigmoide)

Tensoactivo	N° de Carbonos de la Cadena Alquilo	Polímero	Diámetro Medio del Polímero [nm]	Diámetro Teórico del Polímero	Grupo Principal	Diámetro del Agregado de tensioactivo [nm]	Índice de Polidispersidad (PDI)
nHDTP H301	7	SMA 2021™	6.627	3.7	Tioglucopiranósido	8.935	0.011
nODTTP 0320	8	SMA2021™	6.627	3.7	Tiomaltopiranósido	6.022	0.324
Tween 20™	12	SMA 2021™	6.627	3.7	Polisorbato	9.173	0.072
Tween 65™	18	SMA 2021™	6.627	3.7	Polisorbato	114.5	0.286
Vdistill DV53™	18, 18	SMA 2021™	6.627	3.7	Ácido graso	NA	NA
Vdistill DV63™	18,18	SMA 2021™	6.627	3.7	Ácido graso	NA	NA
nHDTP H301	7	SMA 3000™	3.713	2.8	Tioglucopiranósido	8.935	0.011
Tween 20™	12	SMA 3000™	3.713	2.8	Polisorbato	9.173	0.072
Tween 40™	16	SMA 3000™	3.713	2.8	Polisorbato	9.691	0.079
Tween 60™	18	SMA 3000™	3.713	2.8	Polisorbato	134.2	0.637
Tween 80™	18	SMA 3000™	3.713	2.8	Polisorbato	10.42	0.026
Vdistill DV53™	18,18	SMA 3000™	3.713	2.8	Ácido graso	NA	NA
Vdistill DV63™	18,18	SMA 3000™	3.713	2.8	Ácido graso	NA	NA
Genapol X-080	13	SMAIBE	9.759	5.4	Polietilenglicol	10.58	0.147
hegmoe H350	8	SMA IBE	9.759	5.4	Etilenglicol	5.505	0.25
MNAC ₁₂	12	SMA IBE	9.759	5.4	Glucopiranósido	6.122	0.068
MNAC ₁₃	13	SMA IBE	9.759	5.4	Glucopiranósido	6.423	0.046
nHDTP H301	7	SMAIBE	9.759	5.4	Tioglucopiranósido	8.935	0.011
nNDTP N335	9	SMAIBE	9.759	5.4	Tioglucopiranósido	137	0.357
nODTTP 0320	8	SMAIBE	9.759	5.4	Tiomaltopiranósido	6.022	0.324
Poli-10-palmitato	16	SMA IBE	9.759	5.4	Éster de ácido graso de poliglicerol	111.8	0.226
Poli-10-estearato	18	SMA IBE	9.759	5.4	Éster de ácido graso de	112.3	0.172

Tabla 13. Combinaciones de Tensioactivos No Iónicos y Polímeros que no Formaron una Respuesta de Nanorred en los Ensayos de Valoración (No se Detectó Sigmoide)

Tensoactivo	N° de Carbonos de la Cadena Alquilo	Polímero	Diámetro Medio del Polímero [nm]	Diámetro Teórico del Polímero	Grupo Principal	Diámetro del Agregado de tensioactivo [nm]	Índice de Polidispersidad (PDI)
					poliglicerol		
Triton X-100™	8	SMAIBE	9.759	5.4	Etilenglicol	10.07	0.089
Tween 20™	12	SMA IBE	9.759	5.4	Polisorbato	9.173	0.072
Tween 40™	16	SMA IBE	9.759	5.4	Polisorbato	9.691	0.079
Tween 80™	18	SMA IBE	9.759	5.4	Polisorbato	10.42	0.026
Vdistill DV53™	18,18	SMAIBE	9.759	5.4	Ácido graso	NA	NA
Vdistill DV63™	18,18	SMAIBE	9.759	5.4	Ácido graso	NA	NA
nHDTP H301	7	SMA Cumene	7.123	1.5	Tioglucopiranosido	8.935	0.011
nODTTP 0320	8	SMA Cumene	7.123	1.5	Tiomaltopiranosido	6.022	0.324
Poli-10-palmitato	16	SMA Cumene	7.123	1.5	Éster de ácido graso de poliglicerol	111.8	0.226
Tween 20™	12	SMA Cumene	7.123	1.5	Polisorbato	9.173	0.072
Tween 60™	18	SMA Cumene	7.123	1.5	Polisorbato	134.2	0.637
Vdistill DV53™	18,18	SMA Cumene	7.123	1.5	Ácido graso	NA	NA
Vdistill DV63™	18,18	SMA Cumene	7.123	1.5	Ácido graso	NA	NA

Tabla 14. Combinaciones de Tensioactivos Aniónicos y Polímeros que No Formaron una Respuesta de Nanorred en los Ensayos de Titulación (No se Detectó Sigmoide)

Tensoactivo	N° de Carbonos de la Cadena Alquilo	Polímero	Diámetro Medio del Polímero [nm]	Diámetro Teórico del Polímero	Grupo Principal	Diámetro del Agregado de tensioactivo [nm]	Índice de Polidispersidad (PDI)
Sulfonato de 1-octano	8	SMA 725™	15.03	6.8	Sulfonato	1.562	0.367
Antraquinone-2 -sulfonic	0	SMA725™	15.03	6.8	Sulfonato	1.008	0.343

Tabla 14. Combinaciones de Tensioactivos Aniónicos y Polímeros que No Formaron una Respuesta de Nanorred en los Ensayos de Titulación (No se Detectó Sigmoide)

Tensoactivo	N° de Carbonos de la Cadena Alquilo	Polímero	Diámetro Medio del Polímero [nm]	Diámetro Teórico del Polímero	Grupo Principal	Diámetro del Agregado de tensioactivo [nm]	Índice de Polidispersidad (PDI)
Cedepal TD-403 MFLD™	13	SMA725™	15.03	6.8	Éter sulfato	6.421	0.235
n-Octanoil-L- Treonina	8	SMA725™	15.03	6.8	Aminoácido	119	0.372
Dodecylbencenosulfonato de sodio	12	SMA725™	15.03	6.8	Sulfonato	4.235	0.53
Ácido p-Toluenosulfónico	1	SMA725™	15.03	6.8	Sulfonato	0.8236	0.32
Xantogenato de etilo y potasio	2	SMA725™	15.03	6.8	Xantogenato	190.7	0.281
1-pentasulfonato de sodio	5	SMA725™	15.03	6.8	Sulfonato	0.8036	0.537
Stepan sulfonic acid™	12	SMA725™	15.03	6.8	Sulfonato	2.821	0.186
Sal sódica del ácido antraquinona-2 sulfónico	0	SMA 2000™	5.242	2.6	Sulfonato	1.008	0.343
Cedepal TD 403 MFLD™	13	SMA 2000™	5.242	2.6	Éter sulfato	6.421	0.235
n-Octanoil-L-Treonina	8	SMA 2000™	5.242	2.6	Aminoácido	119	0.372
Ácido p-Toluenosulfónico	1	SMA 2000™	5.242	2.6	Sulfonato	0.8236	0.32
Xantogenato de etilo y potasio	2	SMA 2000™	5.242	2.6	Xantogenato	190.7	0.281
L-pentasulfonato de sodio	5	SMA 2000™	5.242	2.6	Sulfonato	0.8036	0.537
Sulfonato de 1-octano	8	DIBMA	92.7	3.2	Sulfonato	1.562	0.367
Amin GCK	18, 8	DIBMA	92.7	3.2	Glicinato de acilo	7.286	0.3
Sal sódica del ácido antraquinona-2 sulfónico	0	DIBMA	92.7	3.2	Sulfonato	1.008	0.343
Stepan Bio Terge AS-40™	14	DIBMA	92.7	3.2	Sulfonato	6.434	0.181
n-Octanoil-L-Treonina	8	DIBMA	92.7	3.2	Aminoácido	119	0.372
Ácido p-Toluenosulfónico	1	DIBMA	92.7	3.2	Sulfonato	0.8236	0.32
Xantogenato de etilo y potasio	2	DIBMA	92.7	3.2	Xantogenato	190.7	0.281
L-pentasulfonato de sodio	5	DIBMA	92.7	3.2	Sulfonato	0.8036	0.537

Tabla 14. Combinaciones de Tensioactivos Aniónicos y Polímeros que No Formaron una Respuesta de Nanorred en los Ensayos de Titulación (No se Detectó Sigmoide)

Tensoactivo	N° de Carbonos de la Cadena Alquilo	Polímero	Diámetro Medio del Polímero [nm]	Diámetro Teórico del Polímero	Grupo Principal	Diámetro del Agregado de tensioactivo [nm]	Índice de Polidispersidad (PDI)
Stepan Bio Soft D-40™	0	SMA 2021™	6.627	3.7	Sulfonato	5.13	0.322
Stepan Bio Terge AS-40™	14	SMA 2021™	6.627	3.7	Sulfonato	6.434	0.181
n-Octanoil-L-Treonina	8	SMA 2021™	6.627	3.7	Aminoácido	119	0.372
Ácido p-Toluenosulfónico	1	SMA 2021™	6.627	3.7	Sulfonato	0.8236	0.32
Xantogenato de etilo y potasio	2	SMA 2021™	6.627	3.7	Xantogenato	190.7	0.281
L-pentasulfonato de sodio	5	SMA 2021™	6.627	3.7	Sulfonato	0.8036	0.537
Sulfonato de 1-octano	8	SMA 3000™	3.713	2.8	Sulfonato	1.562	0.367
Amin GCK	18, 8	SMA 3000™	3.713	2.8	Glicinato de acilo	7.286	0.3
Stepan Bio Soft D-40™	0	SMA 3000™	3.713	2.8	Sulfonato	5.13	0.322
Stepan Bio Terge AS-40™	14	SMA 3000™	3.713	2.8	Sulfonato	6.434	0.181
Cedepal TD-403 MFLD™	13	SMA 3000™	3.713	2.8	Éter sulfato	6.421	0.235
Ácido dodecano-1-sulfónico	12	SMA 3000™	3.713	2.8	Sulfonato	5.108	0.227
n-Octanoil-L-Treonina	8	SMA 3000™	3.713	2.8	Aminoácido	119	0.372
Ácido p-Toluenosulfónico	1	SMA 3000™	3.713	2.8	Sulfonato	0.8236	0.32
Xantogenato de etilo y potasio	2	SMA 3000™	3.713	2.8	Xantogenato	190.7	0.281
1-pentasulfonato de sodio	5	SMA 3000™	3.713	2.8	Sulfonato	0.8036	0.537
Sulfonato de 1-octano	8	SMAIBE	9.759	5.4	Sulfonato	1.562	0.367
Antraquinona-2 sulfónica	0	SMAIBE	9.759	5.4	Sulfonato	1.008	0.343
Stepan Bio Terge AS-40™	14	SMAIBE	9.759	5.4	Sulfonato	6.434	0.181
CedepalTD 403 MFLD™	13	SMAIBE	9.759	5.4	Éter sulfato	6.421	0.235
Ácido dodecano-1-sulfónico	12	SMAIBE	9.759	5.4	Sulfonato	5.108	0.227
Stepan Lathanol LAL™	12	SMAIBE	9.759	5.4	Sulfoacetato	6.814	0.151

Tabla 14. Combinaciones de Tensioactivos Aniónicos y Polímeros que No Formaron una Respuesta de Nanorred en los Ensayos de Titulación (No se Detectó Sigmoide)

Tensoactivo	N° de Carbonos de la Cadena Alquilo	Polímero	Diámetro Medio del Polímero [nm]	Diámetro Teórico del Polímero	Grupo Principal	Diámetro del Agregado de tensioactivo [nm]	Índice de Polidispersidad (PDI)
n-Octanoil-L- treonina	8	SMAIBE	9.759	5.4	Aminoácido	119	0.372
Dodecibencenosulfonato de sodio	12	SMAIBE	9.759	5.4	Sulfonato	4.235	0.53
Ninate 411™	12	SMAIBE	9.759	5.4	Sulfonato	216.2	0.288
Ácido p-Toluenosulfónico	1	SMAIBE	9.759	5.4	Sulfonato	0.8236	0.32
Xantogenato de etilo y potasio	2	SMAIBE	9.759	5.4	Xantogenato	190.7	0.281
1-pentasulfonato de sodio	5	SMAIBE	9.759	5.4	Sulfonato	0.8036	0.537
Sulfonato de 1-octano	8	SMA Cumene	7.123	1.5	Sulfonato	1.562	0.367
Antraquinona-2-sulfónica	0	SMA Cumene	7.123	1.5	Sulfonato	1.008	0.343
Stepan Bio Soft D-40™	0	SMA Cumene	7.123	1.5	Sulfonato	5.13	0.322
Stepan Bio Terge AS-40™	14	SMA Cumene	7.123	1.5	Sulfonato	6.434	0.181
CedepalTD 403 MFLD™	13	SMA Cumene	7.123	1.5	Éter sulfato	6.421	0.235
Ácido dodecano-1-sulfónico	12	SMA Cumene	7.123	1.5	Sulfonato	5.108	0.227
Stepan Lathanol LAL™	12	SMA Cumene	7.123	1.5	Sulfoacetato	6.814	0.151
n-Octanoil-L-treonina	8	SMA Cumene	7.123	1.5	Aminoácido	119	0.372
Ninate 411™	12	SMA Cumene	7.123	1.5	Sulfonato	216.2	0.288
Ácido p-Toluenosulfónico	1	SMA Cumene	7.123	1.5	Sulfonato	0.8236	0.32
Xantogenato de etilo y potasio	2	SMA Cumene	7.123	1.5	Xantogenato	190.7	0.281
L-Penta sulfonato de sodio	5	SMA Cumene	7.123	1.5	Sulfonato	0.8036	0.537

Ejemplo 18

La formación de nanorred prefiere una longitud de cadena alquilo de > C7 en un sistema agregado de tensioactivo puro

[00304] En esta sección, se llevó a cabo un estudio de la influencia de la longitud de la cadena alquilo del tensioactivo en la formación de nanorred. Se empleó una amplia gama de tamaños de agregados de tensioactivos. Los tensioactivos se enumeran en la Tabla 15, incluido el tamaño del agregado de tensioactivo. A pesar de las pequeñas cadenas alquilo, las mediciones de la dispersión de luz de esta clase de agregados tensioactivos mostraron una amplia gama de tamaños de agregados tensioactivos. Sin embargo, en los cinco casos de tensioactivos, con la excepción del 1,2 hexanodiol y SMA 725, no se produjo la formación de nanorred. Esto fue así incluso con el tamaño de partícula de polímero relativamente más pequeño probado.

[00305] Por tanto, los resultados de la Tabla 15 sugieren que, en algunos casos, factores distintos de las proporciones de tamaño relativo pueden influir en la formación de nanorred. Aquí, los resultados sugieren que para los agregados de tensioactivos compuestos puramente por tensioactivos que contienen menos de ocho carbonos en sus longitudes de cadena alquilo hidrófobas lineales, la formación de nanorred no es probable que ocurra dentro de

las escalas de tiempo estudiadas.

Tabla 15. Tensioactivos con una Cadena de Alquilo Lineal de Menos de Ocho Átomos de Carbono						
Tensioactivo	Clase de tensioactivo	Grupo Principal	N° de Carbono de Cadena Alquilo	Con.	Diámetro del Agregado de tensioactivo [nm]	PDI
Ácido p-Toluenosulfónico	Aniónico	Sulfonato	6	10%	0.8236	0.32
Etil Xantogenato de Potasio	Aniónico	Xantogenato	2	10%	190.7	0.281
1-pentasulfonato de sodio	Aniónico	Sulfonato	5	0.25%	0.8036	0.573
1,2 -Hexanodiol	Aniónico	Poliol	6	1%	109.7	0.232
n-Heptil-0-D-Tioglucopira nósido (nHDTP-H310)	No-Iónico	Tioglucopira nósido	7	3%	8.935	0.11

Ejemplo 19

[00306] La formación de nanorred prefiere un agregado de tensioactivo soluble o emulsionado con un diámetro mayor que el diámetro compactado teórico de un polímero SMA. A partir de resultados anteriores, se hizo evidente que los tensioactivos que contienen ácidos grasos, como VDISTILL DV53 y VDISTILL DV63, forman aceites y, por lo tanto, no se pueden mezclar con agua. Como resultado, no se midió el diámetro del agregado de tensioactivo mediante dispersión dinámica de la luz, ya que el tensioactivo no formó una emulsión estable en agua. Puede utilizarse la conversión a un jabón o la solubilización en otros tensioactivos para convertir un aceite de ácido graso insoluble en un agregado de tensioactivo soluble.

[00307] Los tensioactivos no iónicos con grupos de

cabeza hidrófilos ramificados dominan los tensioactivos no iónicos que no forman nanorredes pero satisfacen las reglas de formación de nanorred. A pesar de tener un diámetro agregado de tensioactivo medido más grande que el polímero ensayado, algunos tensioactivos no iónicos todavía no pudieron formar nanorredes. De estos tensioactivos, un número desproporcionado tenía un grupo principal de polisorbato (TWEEN™) o poliglicerol (PGL). Es posible que estos grandes grupos de cabeza inhiban las interacciones del polímero con la cadena alquilo del tensioactivo. Otra posible explicación es que los grupos de cabeza grandes crean una forma de agregado de tensioactivo que no refleja una esfera, lo que crearía un diámetro de agregado de tensioactivo falso o evitaría la asociación del polímero. Una posible explicación adicional es que estos tensioactivos se asocian con los polímeros SMA, pero no son estables después de la precipitación y el tensioactivo puede disociarse de nuevo en solución.

[00308] El efecto de un grupo de cabeza hidrófilo ramificado se puede ilustrar visualmente en la Figura 20. La clase de tensioactivos de grupo de cabeza grande de poliglicerol-10 mostró una tendencia única en comparación con todas las otras clases de tensioactivos. En lugar de aumentar la puntuación de nanorred con la disminución de los valores de HLB, las puntuaciones de nanorred fueron más

altas con los tensioactivos más hidrófilos. Sin embargo, como todos los tensioactivos de poliglicerol-10 formaron grandes agregados de tensioactivos, todavía formaron nanorredes con al menos uno de todos los polímeros ensayados.

[00309] Algunos resultados falsos positivos pueden explicarse, en parte, por un error en el método de apresto y la dependencia de la concentración de la formación de agregados común a los tensioactivos. Como ejemplo, para muchos tensioactivos, el aumento de concentración lleva a que algunos tensioactivos formen estructuras más grandes como micelas parecidas a gusanos, agregados desordenados, geles e incluso bicapas (Gao, J., Ge, W. & Li, J. Sc. China Ser. B-Chem. (2005) 48: 470. <https://doi.org/10.1360/042004-71>). Cuando se realizaron mediciones de DLS en tensioactivos en este trabajo, las soluciones de tensioactivo se diluyeron en serie y se midieron hasta que se obtuvo el mejor PDI. Esto significa que la concentración de tensioactivo durante el encolado podría oscilar entre el 1 y el 0,01% peso/vol. de concentración de tensioactivo, dependiendo del tensioactivo. Sin embargo, en los experimentos de formulación de nanorred descritos y empleados usando el método #1 en este documento, el polímero y el tensioactivo se mezclaron en una solución madre concentrada (1%) antes de la dilución y precipitación

en las valoraciones de formulación de nanorred. Esto aseguró que el agregado de tensioactivo permaneciera por encima de su concentración micelar crítica; y por lo tanto estuvo presente para interactuar con el polímero antes de la dilución y precipitación. Como resultado, la concentración efectiva y el diámetro del agregado de tensioactivo en los experimentos de formación de nanorred podrían ser significativamente más altos que la concentración y el tamaño registrado a los que se midió el apresto del tensioactivo.

[00310] El diámetro agregado de tensioactivo medido para varios tensioactivos comercializados, particularmente Biosoft, Bioterge, Cedepal y Ninat 411, era mayor que el diámetro teórico del polímero para cada polímero ensayado (Tabla 15). Por tanto, se esperaba que ocurriera la formación de nanorred usando estos tensioactivos con todos los polímeros probados. Sin embargo, aunque cada tensioactivo podría formularse en una nanorred con al menos un polímero, otros factores conducen a que no todas las combinaciones den como resultado la formación de nanorredes. Por ejemplo, solo seleccione nanorredes formadas por polímeros con los siguientes tensioactivos: Stepan Bio-Soft D-40™, Stepan Bio-Terge AS-40™, Cedepal TD-403 MFLD™ y Ninat 411™ tensioactivos (Tabla 15). Además, el tensioactivo Ninat 411™ no mostró signos de formación

de nanorredeas con los siguientes polímeros: SMA-IBE y SMA cumeno (Tabla 15). Para estos dos polímeros, se observó una diferencia significativa entre el diámetro de partícula teórico y medido por DLS (5,8 nm por DLS y diámetro de partícula teórico de 2,8 nm). Además, estos dos polímeros también contienen diferentes proporciones de grupos funcionales hidrófobos a hidrófilos en sus unidades de bloques repetidos.

[00311] Por tanto, es poco probable que las tendencias en el tamaño de las partículas del polímero o la hidrofobicidad del bloque estén impidiendo la formación de nanorredeas con Ninete 411™. Lo más probable es que los tensioactivos probados disponibles comercialmente no sean productos químicos puros y, por lo tanto, pueden tener componentes secundarios que alteran el comportamiento del polímero o que complican las mediciones de apresto. Por ejemplo, hay dos formulaciones diferentes de Bio-Terge disponibles para la compra comercial, Bio-Terge 40S o Bio-Terge 40K, las cuales contienen olefina sulfonato de sodio C₁₄-C₁₆ como ingrediente activo principal. Sin embargo, mientras que la formulación 40S es adecuada para aplicaciones en la preparación de microemulsiones estables, la formulación 40k solo se recomienda como detergente de lavado general (hoja de producto del fabricante).

[00312] Es probable que los aditivos, disolventes o

restos no revelados del proceso de fabricación del tensioactivo en estas formulaciones puedan afectar negativamente a la formación de nanorred. También puede darse el caso de que existan datos inexactos sobre el tamaño del tensioactivo. Esto puede explicar algunas de las inconsistencias entre la observación prevista y real en los experimentos de formación de nanorred entre los diferentes polímeros. Por ejemplo, si una determinada combinación de polímero tensioactivo no dio como resultado la formación de nanorredes con alta eficiencia, un ligando estabilizador o co-tensioactivo en el exterior de la micela tensioactiva (como isopropilamina en el caso de Ninete 411TM), puede proteger el agregado de tensioactivo e inhibir la formación de nanorredes.

[00313] La diferencia de tamaño entre un agregado de tensioactivo y una partícula de polímero anfipático, impulsada por el efecto hidrófobo, se ha probado usando 7 polímeros diferentes y más de 50 tensioactivos únicos. Los datos apoyan firmemente la proposición de que la formación de nanorredes requiere un agregado de tensioactivo con un diámetro mayor que el diámetro del diámetro mínimo de partícula monomérica con el que se asocia el agregado de tensioactivo. Además, se favoreció fuertemente la formación de nanorredes usando los polímeros probados con lo siguiente: (1) más de 7 carbonos en la cadena alquilo

hidrófobo en el tensioactivo, (2) el tensioactivo es miscible en agua, (3) tensioactivos con grupos de cabezas relativamente más pequeños. Tomados en conjunto, los resultados sugieren que el diseño de nanorred puede mejorarse seleccionando un copolímero de bloque anfipático, cuya longitud puede basarse en el tamaño del agregado de tensioactivo. La gran mayoría de las nanorredes formadas mostraron un aumento de diámetro en relación con el polímero de partida (Figura 18).

Ejemplo 20

La composición del polímero influye en la captura del tensioactivo en nanorredes.

[00314] Se llevó a cabo un estudio de los tensioactivos y la influencia de los parámetros, incluido el grado de miscibilidad con el agua, con respecto a la formación de nanorred. En el estudio, los factores que influyeron en la formación de nanorredes deseables incluyeron los siguientes: Un copolímero de bloque anfipático soluble en agua con una estequiometría de bloque de X_nY_m . X es un grupo funcional hidrófilo aniónico o no iónico. Y es un grupo funcional hidrofóbico. En la fórmula del polímero, $n = 1$ y $m = 1, 2$ o 3 .

[00315] La biblioteca de nanorred se expandió probando polímeros con diferentes grupos funcionales. Los factores explorados incluyeron, la longitud del polímero,

las proporciones de los grupos funcionales del polímero, dos grupos químicos hidrófobos distintos. Los polímeros probados se describen en la Tabla 16. Para todos los polímeros probados, se podrían formar nanorredes con agregados de tensioactivos mayores que el diámetro de las partículas de polímero compacto (Figura 19). Las puntuaciones máximas de AUC sigmoidea para la formación de nanorred se observaron con polímeros que tenían una relación de estireno a ácido maleico de 2: 1, seguida de 3: 1, seguida de 1:1. Los polímeros relativamente más cortos generalmente tenían puntuaciones más altas para la formación de nanorred.

Tabla 16. Caracterización Dinámica de la Dispersión de Luz Usando Valores de Intensidad y Número de Agregados Poliméricos Hidrolizados								
Polímero	Relación [St] a [MA]	Diámetro Agregado Calculado [nm]	Con.	Diámetro Agregado [nm] (Intensidad Media d)	PDI	Con.	Diámetro Agregado [nm] (Media Numérica d)	PDI
SMA-2000™	2:1	2.6	0.10%	5.242	0.113	0.10%	4.633	0.292
SMA-2021™	2:1	3.7	0.25%	6.627	0.274	0.10%	8.383	0.169
SMA-3000™	3:1	2.8	0.25%	3.713	0.213	0.01%	4.68	0.355
SMA-725™	3:1	6.8	0.10%	15.03	0.219	0.10%	10.16	0.283
SMA- cumene terminated	3:1	1.5	0.10%	7.123	0.164	0.50%	3.325	0.297
SMA-IBE	1:1	5.4	0.25%	9.759	0.209	0.01%	4.256	0.869
DIBMA	NA	3.2	0.50%	76.74*	0.135	0.10%	5.704	0.271

[00316] Es probable que no todas las combinaciones posibles de tensioactivo y polímero formen nanorredes dentro del marco de tiempo de los métodos de cribado empleados (véase el Ejemplo 15). 33/116 combinaciones de

polímero más tensioactivo no dieron como resultado una puntuación que indicara la formación de nanorred mediante el método de cribado #1 (véanse los Ejemplos de reactivos y materiales 15-21). Estos resultados (sin formación de nanorred) pueden predecirse usando las enseñanzas descritas en este documento. Sin embargo, el 5,4% (14/306) o de las formulaciones seleccionadas en el método #2 (ver Reactivos y Materiales Ejemplos 15-21) dieron como resultado una puntuación que indica la formación de nanorredes. Sin embargo, basándose únicamente en el tamaño relativo, la formación de nanorred no se habría predicho. El diámetro del agregado de tensioactivo era menor que el diámetro de las partículas de polímero. Por lo tanto, no se habría predicho que ocurriera la formación de nanorredes utilizando las enseñanzas de este documento. Estos resultados falsos positivos pueden atribuirse a: En el método de cribado #1, el modelo informático desarrollado puede haber interpretado un aumento relativamente pequeño de la absorbancia como formación de una curva sigmoidea. El resultado habría sido una puntuación baja, pero positiva, que indicaría la formación de nanorred; incluso cuando no se formaron nanorredes. Los resultados falsos negativos pueden atribuirse a: puntos de titulación insuficientes; en algunos trazos, la formación de nanorred se produjo en una sola proporción probada, lo que significa que la ventana de

asociación es muy pequeña. En otros trazos, las curvas de titulación solo comenzaron a aumentar a las concentraciones más altas de la titulación. Estas señales se perderían en los experimentos actuales.

[00317] Método ROUT de análisis estadístico para la identificación de puntos de datos atípicos

[00318] También se desarrolló una base racional para eliminar algunos puntos de datos identificados inicialmente por el modelo. Por ejemplo, los resultados se examinaron más a fondo para eliminar aquellos casos con factores de formación bajos, N_f y valores de absorbancia inferiores a 0,2 (Tabla 9 y 10). Se analizaron valores atípicos en el conjunto de datos para las combinaciones de polímero tensioactivo analizadas mediante el método de cribado #4 (véanse los Ejemplos de reactivos y materiales 15-21) para la formación de nanorred. El método empleado fue similar al descrito por (Motulsky, H.J., Brown, and R.E. Detecting in Outliers When Fitting Data With Nonlinear Regression - A New Method Based On Robust Nonlinear Regression And The False Discovery Rate. BMC Bioinformatics 7, 123 (2006)). Utilizando el método ROUT, se identificaron valores atípicos en el tamaño del tensioactivo tanto en los conjuntos de datos de nanorred de puntuación positiva como en los conjuntos de datos de nanorredes de puntuación negativa.

[00319] Por tanto, el cribado más el análisis ROUT redujo el número de resultados falsos positivos a 9/192 resultados. Esto significa que en solo 9/192 casos, se obtuvo una puntuación de falso positivo para la formación de nanorred.

[00320] Los factores distintos de la relación de tamaño también pueden explicar los resultados. Estos factores pueden incluir: (1) número de carbonos de la cadena alquilo del tensioactivo, (2) solubilidad en agua del tensioactivo y (3) equilibrio de lípidos hidrófobos del tensioactivo. Además, puede haber algunas fuentes de error en la medición del tamaño de partículas de polímero y agregado de tensioactivo. Otras razones de la disparidad entre los resultados esperados y observados pueden incluir: (1) composición del tensioactivo, (2) pureza del tensioactivo, (3) composición del polímero, (4) distribución del peso molecular, (5) tamaño del grupo de cabeza del tensioactivo, (6) empaque del tensioactivo parámetros, y (7) distribución de comonómeros. Por ejemplo, en varios casos, nuestras medidas de la longitud del contorno del polímero y el peso molecular variaron de las especificaciones proporcionadas con las muestras disponibles comercialmente. Lo que sigue es una discusión más detallada de estos otros factores.

Número de carbonos de la cadena alquilo del

tensioactivo.

[00321] Cinco de los 62 tensioactivos probados contenían pequeños segmentos hidrófobos (cadena alquilo lineal con menos de 7 carbonos). Curiosamente, cinco de estos tensioactivos no dieron como resultado una puntuación que indique la formación de nanorred utilizando el método #1 (ensayo de titulación, Tabla 15). Este fue el caso de todos los polímeros probados con la excepción del tensioactivo 1,2 hexanodiol con SMA-725TM.

[00322] Las mediciones de DLS de esta clase de agregados tensioactivos de bajo índice de carbono mostraron una amplia gama de tamaños de agregados tensioactivos. Este último resultado sugiere que para los agregados compuestos puramente por tensioactivos que contienen menos de ocho carbonos en sus cadenas alquilo hidrófobas lineales, es probable que no se produzca la formación de nanorred. Por tanto, la conclusión más general es que la formación de nanorred es más probable que se produzca cuando el tensioactivo tiene un número de carbonos de la cadena alquilo superior a siete cuando se mide como un agregado de tensioactivo puro. El efecto del número de la cadena alquilo se puede visualizar aún más examinando la formación de nanorred con grupos de cabeza de tensioactivo seleccionados y cadenas alquilo variables (Figura 21) En casi todos los casos, un aumento en el número de cadena

alquilo conduce a un aumento en la puntuación de nanorred y una mayor probabilidad de formando una nanorred con los polímeros probados (Figs. 21A-D). De manera similar, las puntuaciones de nanorred generalmente mostraron un efecto inverso con los grupos de cabeza hidrófilos: a medida que aumentaron los valores de HLB debido a un aumento en el número de grupos de cabeza hidrófilos, las puntuaciones de nanorred disminuyeron (Figs. 21E y F). Este efecto de la longitud de la cadena alquilo y el HLB en el tensioactivo sobre las puntuaciones de nanorred, y la compatibilidad con diferentes polímeros, sugiere que la formación de nanorred ocurre mejor con la proporción de bloque 2:1. A medida que la composición de polímero cambia de 2:1 a 3:1 o 1:1, el número de posibles nanorredes a formar generalmente disminuye. Además, a medida que disminuye la longitud del polímero, se pueden formar nanorredes con agregados de tensioactivo más pequeños y más hidrófilos (valores altos de HLB). Es probable que lo inverso también sea cierto: cuanto más hidrófobo es el tensioactivo, más grande es el polímero y se prefiere el bloque más hidrófobo. Por ejemplo, el 1,2-hexanodiol o VDISTILL 53TM, con valores de HLB calculados de 7,9 (utilizando el método de Davies, J.T. Davies, E.K. Rideal, Interfacial Phenomena, Academic Press, New York, 1961, p. 371.) y 1, respectivamente, solo se encontró que se asociaban con el polímero más hidrofóbico;

SMA-725™.

Ejemplo 21

Formación de biblioteca de nanorred optimizada:

[00323] Para los tratamientos químicos del agua, se requiere poca o ninguna contaminación de los efluentes aguas abajo por el químico introducido. Por lo tanto, en una formulación de nanorred, la mayoría del tensioactivo debe unirse al polímero, para minimizar cualquier tensioactivo residual aguas abajo en el proceso de tratamiento. Para identificar la cantidad óptima de tensioactivo, se pueden utilizar los datos de titulación para un tensioactivo dado. El punto medio de cada curva de titulación, también denominado N_f , representa la unión de tensioactivo medio máxima. El punto medio se calculó de acuerdo con el método #4 (véanse los Ejemplos de reactivos y materiales 15-21). A esta concentración, se espera que el polímero esté en exceso, por lo que hay un mínimo de tensioactivo en la solución y se espera que al menos la mitad de todo el polímero esté en un complejo de nanorred. Se consideró que los tensioactivos con puntos intermedios altos (>500 ppm) para un polímero dado tenían baja afinidad y, por lo tanto, estas combinaciones no se identificaron para formar nanorredes estables.

[00324] Con el fin de identificar mejor las nanorredes estables, la altura del pico de absorción de

cada combinación de tensioactivo y polímero se filtró a 0,2 y más para obtener una biblioteca de nanorred optimizada. En los datos de titulación, un pico de absorbancia bajo es representativo de un pequeño agregado de tensioactivo capturado por el polímero y, por lo tanto, es una combinación de nanorred ineficaz y es probable que conduzca a altas concentraciones de tensioactivo residual después de la eliminación de cualquier nanorred formada. A partir de estos resultados, debe entenderse que estas combinaciones filtradas aún pueden formar pequeñas cantidades de complejos de nanorred, pero no son óptimas y que un polímero diferente puede ser más apropiado.

[00325] Usando este enfoque, se identificó una biblioteca de nanorredes que contenía aproximadamente 199 nanorredes optimizadas estables. La biblioteca de nanorred contiene una amplia gama de tensioactivos aniónicos y no iónicos con longitudes de cadena alquilo lineal que varían de C₈ a C₁₈. Los grupos de cabeza hidrófilos contenidos en la biblioteca de nanorred son de naturaleza diversa, incluidos sulfonatos, ésteres de fosfato, óxidos de fosfina, monosacáridos, disacáridos, tioésteres, aminoácidos, glicoles y poligliceroles. La biblioteca completa de nanorred se documenta en las Tablas 9 y 10.

Tabla 17. Eliminación de Cobre (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos No Iónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Cu ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
A1	1	Apo 10/DIBMA	10.03	9.9	-1.9
A2	2	Apo 12/DIBMA	10.03	6.8	-32.4
Ã3	3	Glucósido de Coco/DIBMA	10.03	10.4	3.3
A4	4	Genapol X080/DIBMA	10.03	10.1	0.3
A5	5	HEGMDDE-H370/DIBMA	10.03	8	-20.7
A6	6	HEGMDE-H360/DIBMA	10.03	10.4	3.5
A7	7	HXEGMDDE-H375/DIBMA	10.03	10.1	-0.2
A8	8	DDDM-MNA-C ₁₂ /DIBMA	10.03	7.8	-22.2
A9	9	pGBTM-MNA-C ₁₃ /DIBMA	10.03	9.3	-8
A10	10	pGBTEM-MNA-C ₁₄ /DIBMA	10.03	8	-20.9
A11	11	nDDDT-P-D342/DIBMA	10.03	10	-1.2
A12	12	nDDTGP-D323/DIBMA	10.03	8.9	-11.4
B1	13	OEGMDE-O330/DIBMA	10.03	7.1	-29.4
B2	14	Poliglicerol-10-monolaurato/DIBMA	10.03	9.5	-6.1
B3	15	Poliglicerol-10-monooleato/DIBMA	10.03	7.1	-29.6
B4	16	Span 20/DIBMA	10.03	10.4	3.6
B5	17	Triton X-100™/DIBMA	10.03	9.7	-3.2
B6	18	Triton X-45™/DIBMA	10.03	9.9	12.3
B7	19	Tween 20™/DIBMA	10.03	7.4	-26.9
B8	20	Tween 65™/DIBMA	10.03	7.8	-23
B9	21	Tween 85™/DIBMA	10.03	9.5	-5.2
B10	22	Apo 10/SMA2000™	10.03	0.9	-91.1
B11	23	Apo 12/SMA2000™	10.03	0.5	-95.4
B12	24	Glucósido de Coco/SMA 2000™	10.03	1	-90.1
C1	25	Genapol X080/SMA 2000™	10.03	1	-90.2
C2	26	HEGMDDE-H370/SMA 2000™	10.03	1.5	-85.2
C3	27	HEGMDE-H360/SMA 2000™	10.03	0.9	-90.6
C4	28	HEGMOE-H350/SMA 2000™	10.03	1.4	-85.7
C5	29	HXEGMDDE-H375/SMA 2000™	10.03	1.1	-89.4
C6	30	pGBTM-MNA-C ₁₃ /SMA 2000™	10.03	0.8	-91.6
C7	31	pGBTEM-MNA-C ₁₄ /SMA 2000™	10.03	1.2	-88.1
C8	32	nDDDT-P-D342/SMA 2000™	10.03	1	-90
C9	33	nDDTGP-D323/SMA 2000™	10.03	0.9	-90.9
C10	34	nDDTP-D335/SMA 2000™	10.03	1.3	-87.5
C11	35	OEGMDE-O330/SMA 2000™	10.03	0.9	-91
C12	36	Poliglicerol-10-monolaurato/SMA 2000™	10.03	1.2	-87.8
DI	37	Poliglicerol-10-monooleato/SMA 2000™	10.03	1	-90.1
D2	38	Span 20/SMA 2000™	10.03	1	-89.8

Tabla 17. Eliminación de Cobre (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos No Iónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Cu ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
D3	39	Triton X-100™/SMA 2000™	10.03	1.1	-89.4
D4	40	Triton X-305™/SMA 2000™	10.03	1.1	-88.7
D5	41	Triton X-45™/SMA 2000™	10.03	1	-89.9
D6	42	Tween 20™/SMA 2000™	10.03	1.2	-88.5
D7	43	Tween 40™/SMA 2000™	10.03	0.6	-93.6
D8	44	Tween 60™/SMA 2000™	10.03	1.1	-89.1
D9	45	Tween 65™/SMA 2000™	10.03	1.3	-86.6
D10	46	Tween 80™/SMA 2000™	10.03	1.1	-89.2
D11	47	Tween 85™/SMA 2000™	10.03	0.8	-91.6
D12	48	Apo 10/SMA 2021™	10.03	1.4	-86
E1	49	Apo 12/SMA 2021™	10.03	1.2	-88.3
E2	50	Glucósido de Coco/SMA 2021™	10.03	1.1	-88.9
E3	51	HEGMDDE-H370/SMA 2021™	10.03	1	-89.6
E4	52	HEGMDE-H360/SMA 2021™	10.03	1.1	-89.5
E5	53	HXEGMDDE-H375/SMA 2021™	10.03	1	-89.8
E6	54	pGBTM-MNA-C ₁₃ /SMA 2021™	10.03	1.2	-87.7
E7	55	pGBTEM-MNA-C ₁₄ /SMA 2021™	10.03	0.9	-90.8
E8	56	nDDTGP-D323/SMA 2021™	10.03	1	-90.1
E9	57	nDDDTP-D342/SMA 2021™	10.03	1.2	-88.2
E10	58	OEGMDE-O330/SMA 2021™	10.03	1.2	-88.3
E11	59	Poliglicerol-10-monolaurato/SMA 2021™	10.03	0.9	-90.6
E12	60	Poliglicerol-10-monooleato/SMA 2021™	10.03	0.8	-92.5
F1	61	Triton X-100™/SMA 2021™	10.03	1.9	-81.5
F2	62	Triton X-45™/SMA 2021™	10.03	1.3	-87.2
F3	63	Tween 40™/SMA 2021™	10.03	1.2	-87.8
F4	64	Tween 60™/SMA 2021™	10.03	1.2	-88.3
F5	65	Tween 80™/SMA 2021™	10.03	2.2	-78.1
F6	66	Tween 85™/SMA 2021™	10.03	1.2	-88.1
F7	67	Apo 10/SMA 3000™	10.03	3.9	-61.5
F8	68	Apo 12/SMA 3000™	10.03	4	-59.9
F9	69	Glucósido de Coco/SMA 3000™	10.03	5.4	-46.4
F10	70	Genapol X080/SMA 3000™	10.03	0.8	-91.8
F11	71	HEGMDDE-H370/SMA 3000™	10.03	3.8	-61.9
F12	72	HEGMDE-H360/SMA 3000™	10.03	4.1	-59.6
G1	73	HXEGMDDE-H375/SMA 3000™	10.03	1.2	-88.2
G2	74	DDDM-MNA-C ₁₂ /SMA 3000™	10.03	4.6	-54
G3	75	pGBTM-MNA-C ₁₃ /SMA 3000™	10.03	4.3	-57.4
G4	76	pGBTEM-MNA-C ₁₄ /SMA 3000™	10.03	4.8	-52.5
G5	77	nDDDTP-D342/SMA 3000™	10.03	5.6	-44.3

Tabla 17. Eliminación de Cobre (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos No Iónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Cu ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
G6	78	nDDTGP-D323/SMA 3000™	10.03	1.6	-84.4
G7	79	OEGMDE-O330/SMA 3000™	10.03	3.5	-65.6
G8	80	Poliglicerol-10-monolaurato/SMA 3000™	10.03	0.8	-92.2
G9	81	Poliglicerol-10-monooleato /SMA 3000™	10.03	0.5	-94.7
G10	82	Poliglicerol-10-monopalmitato/SMA 3000™	10.03	1.2	-87.9
G11	83	Span 20/SMA 3000™	10.03	0.6	-93.6
G12	84	Triton X-100/SMA 3000™	10.03	1.8	-81.7
H1	85	Triton X-45™/SMA 3000™	10.03	1.1	-89.2
H2	86	Tween 65™/SMA 3000™	10.03	1.1	-89.2
H3	87	Tween 85™/SMA 3000™	10.03	4	-60.6
H4	88	Apo 12/SMA-IBE	10.03	1.4	-86
H5	89	Glucósido de Coco/SMA-IBE	10.03	1.6	-83.9
H6	90	HEGMDDE-H370/SMA-IBE	10.03	1.1	-92.8
H7	91	HEGMDE-H360/SMA-IBE	10.03	1.6	-84
H8	92	HXEGMDDE-H375/SMA-IBE	10.03	1.5	-85
H9	93	nDDTGP-D342/SMA-IBE	10.03	1.5	-85.1
H10	94	nDDTGP-D335/SMA-IBE	10.03	1.2	-88.1
H11	95	Poliglicerol-10-monooleato/SMA-IBE	10.03	1.2	-88.3
H12	96	Triton X-45™/SMA-IBE	10.03	1	-89.7
A1	97	Tween 85™/SMA-IBE	10.03	1.5	-85.1
A2	98	Genapol X080/SMA 725™	10.03	2	-79.8
A3	99	nDDTGP-D342/SMA 725™	10.03	0.9	-91.1
A4	100	nDDTGP-D323/SMA 725™	10.03	1	-89.6
A5	101	Poliglicerol-10-monooleato/SMA 725™	10.03	0.5	-94.7
A6	102	Span 20/SMA 725™	10.03	1.1	-88.6
A7	103	HEGMDDE-H370/SMA 725™	10.03	1.5	-85.3
A8	104	HEGMDE-H360/SMA 725™	10.03	1.9	-81.4
A9	105	HXEGMDDE-H375/SMA 725™	10.03	1.3	-86.7
A10	106	pGBTEM-MNA-C ₁₄ /SMA 725™	10.03	1.7	-83.5
A11	107	Poliglicerol-10-monopalmitato/SMA 725™	10.03	1	-90.1
A12	108	Triton X-100™/SMA 725™	10.03	2.4	-76.6
B1	109	Triton X-45™/SMA 725™	10.03	1.4	-85.6
B2	110	Tween 65™/SMA 725™	10.03	1.3	-86.7
B3	111	Tween 80™/SMA 725	10.03	1.6	-83.7
B4	112	Apo 10/SMA Cumene	10.03	0.8	-91.7
B5	113	Apo 12/SMA Cumene	10.03	1	-90.4
B6	114	PFDMP-O310F/SMA Cumene	10.03	1.1	-89.4

Tabla 17. Eliminación de Cobre (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos No Iónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Cu ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
B7	115	Genapol X080/SMA Cumene	10.03	0.9	-91
B8	116	HEGMDDE-H370/SMA Cumene	10.03	0.9	-90.8
B9	117	HEGMDDE-H360/SMA Cumene	10.03	0.9	-90.8
B10	118	HXEGMDDE-H375/SMA Cumene	10.03	0.8	-92.1
B11	119	DDDM-MNA-C ₁₂ /SMA Cumene	10.03	0.7	-92.9
B12	120	pGBTM-MNA-C ₁₃ /SMA Cumene	10.03	0.6	-93.6
C1	121	nDDTTP-D342/SMA Cumene	10.03	1.3	-87.4
C2	122	nDDTGP-D323/SMA Cumene	10.03	0.8	-92
C3	123	nDDTP-D335/SMA Cumene	10.03	0.8	-92.1
C ₄	124	OEGMDE-O330/SMA Cumene	10.03	1.3	-87.4
C ₅	125	Poliglicerol-10-monolaurato/SMA Cumene	10.03	1.4	-86.5
C ₆	126	Poliglicerol-10-monooleato/SMA Cumene	10.03	1.2	-88.4
C ₇	127	Span 20/SMA Cumene	10.03	0.7	-93.3
C ₈	128	Triton X-100™/SMA Cumene	10.03	1	-90.4
C ₉	129	Triton X-45™/SMA Cumene	10.03	1.2	-88.3
C₁₀	130	Tween 65™/SMA Cumene	10.03	1.4	-85.9
C₁₁	131	Tween 85™/SMA Cumene	10.03	1.2	-87.9

Tabla 18. Eliminación de Cobre (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos Aniónicos					
Pocillo N°	Biblioteca a N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Cu ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
A1	1	Stepan Bio-Soft D-40™/DIBMA	10.03	9.2	-8.2
A2	2	Lakeland PAE136™/DIBMA	10.03	8.9	-11.6
A₃	3	Stepan Lathanol LAL™/DIBMA	10.03	9.6	-4.5
A4	4	n-Decanoil-L-Treonina/DIBMA	10.03	9.4	-6
A5	5	n-Dodecanoil-L-Treonina/DIBMA	10.03	9.5	-5.2
A6	6	n-Decanoil-L-Metionina/DIBMA	10.03	9	-10.7
A7	7	n-Dodecanoil-L-Metionina/DIBMA	10.03	8.8	-12.4
A8	8	Ninate 411™/DIBMA	10.03	9.8	-2.3
A9	9	n-Octanoil-L-Metionina/DIBMA	10.03	9.3	-7.5
A10	10	Stepan Mild L3™/DIBMA	10.03	8.5	-15.1
A11	11	Stepan Bio-Terge AS-40™/SMA 2000™	10.03	1.3	-87.2
A12	12	Stepan Bio-Soft D-40™/SMA 2000™	10.03	1.2	-88.2
B1	13	Sal sódica del ácido dodecano-1-sulfónico/SMA 2000™	10.03	1.5	-85.1
B2	14	Lakeland PAE 136™/SMA 2000™	10.03	0.8	-91.7
B3	15	Stepan Lathanol LAL™/SMA 2000™	10.03	1.2	-88.4
B4	16	n-Decanoil-L-Metionina/SMA 2000™	10.03	1.4	-86.3
B5	17	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA 2000™	10.03	1.6	-83.6

Tabla 18. Eliminación de Cobre (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos Aniónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Cu ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
B6	18	n-Decanoil-L-Treonina/SMA 2000™	10.03	1.5	-84.9
B7	19	n-Dodecanoil-L-Histidina/SMA 2000™	10.03	0.7	-93.4
B8	20	Stepan Mild L3™/SMA 2000™	10.03	1.4	-86.3
B9	21	n-Dodecanoil-L-Treonina/SMA 2000™	10.03	1.4	-86
B10	22	Dodecylbencenosulfonato de sodio/SMA 2000™	10.03	1.4	-86.3
B11	23	Ninate 411™/SMA 2000™	10.03	1.5	-85.1
B12	24	Stepan SLL-FB™/SMA 2000™	10.03	0.9	-90.9
C1	25	Stepan Sulfonic Acid™/SMA 2000™	10.03	2.5	-75.5
C2	26	Sal sódica del ácido dodecano-1-sulfónico/SMA 2021™	10.03	1.1	-88.9
C3	27	Lakeland PAE 136™/SMA 2021™	10.03	1.3	-87.2
C4	28	Stepan Lathanol LAL/SMA 2021™	10.03	1.4	-86.3
C5	29	n-Decanoil-L-Metionina/SMA 2021™	10.03	1.1	-89
C6	30	Cedepal TD-403 MFLD™/SMA 2021™	10.03	1.2	-88.1
C7	31	Stepan Mild L3™/SMA 2021™	10.03	9.2	-8.7
C8	32	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA 2021™	10.03	1.6	-84.3
C9	33	n-Decanoil-L-Metionina/SMA 3000™	10.03	4.6	-54.6
C10	34	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA 3000™	10.03	4.6	-54.3
C11	35	n-Decanoil-L-Treonina/SMA 2021™	10.03	1.9	-81.2
C12	36	n-Dodecanoil-L-Treonina/SMA 2021™	10.03	1.6	-84.3
DI	37	Dodecylbencenosulfonato de sodio/SMA 2021™	10.03	1.5	-84.7
D2	38	Ninate 411™/SMA 2021™	10.03	1.5	-85.4
D3	39	Stepan SLL-FB™/SMA 2021™	10.03	2.1	-79.1
D4	40	Stepan Sulfonic Acid™/SMA 2021™	10.03	1.7	-82.7
D5	41	Lakeland PAE 136™/SMA 3000™	10.03	4.1	-59.6
D6	42	n-Dodecanoil-L-Treonina/SMA 3000™	10.03	4.5	-54.9
D7	43	Ninate 411™/SMA 3000™	10.03	3.2	-68.3
D8	44	Stepan Mild L3™/SMA 3000™	10.03	4.6	-54.2
D9	45	Stepan SLL-FB™/SMA 3000™	10.03	4.2	-58
D10	46	Stepan Sulfonic Acid™/SMA 3000™	10.03	3.4	-66.5
D11	47	n-Decanoil-L-Metionina/SMA-IBE	10.03	2	-79.8
D12	48	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA- IBE	10.03	1.4	-85.8
E1	49	Stepan Mild L3™/SMA-IBE	10.03	1.7	-83.5
E2	50	Stepan SLL-FB™/SMA-IBE	10.03	1.6	-84
E3	51	Amin GCK30H/SMA 725™	10.03	2	-79.8
E4	52	Stepan Bio-Terge AS-40™/SMA 725™	10.03	1.5	-85.3
E5	53	n-Dodecanoil-L-Histidina/SMA 725™	10.03	1.1	-88.7
E6	54	Stepan Lathanol LAL™/SMA 725™	10.03	1.3	-86.9
E7	55	n-Decanoil-L-Metionina/SMA 725™	10.03	1.7	-83.5

Tabla 18. Eliminación de Cobre (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos Aniónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Cu ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
E8	56	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA 725™	10.03	1.6	-84.2
E9	57	Sal sódica del ácido dodecano-1-sulfónico/SMA 725™	10.03	1.4	-86.1
E10	58	Lakeland PAE 136™/SMA 725™	10.03	1.6	-84.2
E11	59	n-Dodecanoil-L-Treonina/SMA 725™	10.03	1.3	-87.4
E12	60	Stepan Mild L3™/SMA 725™	10.03	1.5	-84.8
F1	61	Stepan SLL-FB™/SMA 725™	10.03	1.3	-86.6
F2	62	Lakeland PA E136™/SMA Cumene	10.03	1.3	-87
F3	63	n-Dodecanoil-L-Treonina/SMA Cumene	10.03	2	-80
F4	64	Stepan Mild L3™/SMA Cumene	10.03	1.4	-85.7
F5	65	Stepan SLL-FB™/SMA Cumene	10.03	1.3	-86.6
F6	66	n-Decanoil-L-Metionina/SMA Cumene	10.03	1.4	-85.6
F7	67	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA Cumene	10.03	3.1	-68.9
F8	68	n-Dodecanoil-L-Histidina/SMA Cumene	10.03	1.4	-85.6

Ejemplo 22

Prueba de pantalla de concepto de biblioteca de nanorred para secuestrar iones metálicos divalentes zinc y cobre que se encuentran en el agua de mar

[00326] Los metales contenidos en el agua de mar son una amenaza para los sistemas y organismos acuáticos. La eliminación de metales pesados del agua de mar o aguas residuales a menudo se aborda mediante la precipitación de iones metálicos disueltos seguida de filtración. Sin embargo, estos métodos pueden ser un desafío ya que requieren el control del pH del agua de mar.

[00327] Se examinaron las bibliotecas de nanorred con tensioactivos aniónicos y no iónicos para la eliminación de iones metálicos de zinc y cobre del agua de

mar enriquecida con iones metálicos de zinc y cobre (véanse los Ejemplos de reactivos y materiales 15-21, método #3). Todos los polímeros hidrolizados que contienen SMA mostraron una excelente eliminación de iones metálicos Cu^{2+} del agua de mar, especialmente los polímeros SMA-2000™, SMA-2021™ y SMA-725™ con tensioactivos con grupos de cabeza que contienen sulfonato y aminoácidos (Figura 22). En contraste, las nanorredes con DIBMA mostraron iones metálicos Cu^{2+} restantes (< 10 ppm) en el agua de mar. La Figura 23 ilustra una excelente eliminación de iones metálicos Cu^{2+} del agua de mar con nanorredes con tensioactivos no iónicos y SMA-2000™, SMA-2021™, SMA-Cumene terminated™ y SMA-725™. Por el contrario, las nanorredes con SMA-3000™ y DIBMA™ fueron menos eficientes en la eliminación de iones metálicos. En general, las nanorredes con tensioactivos aniónicos fueron menos eficientes para la eliminación de iones metálicos de zinc del agua de mar, específicamente en combinación con SMA-3000™ y DIBMA™ (Figura 24). Curiosamente, el tensioactivo N-Dodecanoil-L-Histidina en combinación con SMA-2000™, SMA-725™ y SMA-Cumene terminado™ fue más eficaz en la eliminación de iones metálicos Zn^{2+} junto con SMA-725™ y Dodecano-1-sulfónico ácido (Figura 24). Las nanorredes con tensioactivos no iónicos y SMA-2000™ y SMA-Cumene terminado™ eliminaron el ión metálico de zinc con menos de 5 ppm de Zn^{2+} restante en

la solución (Figura 25). Las nanorredeas con SMA-3000™ y DIBMA™ fueron menos eficientes en la eliminación de iones metálicos. Este trabajo demuestra que las nuevas formulaciones de tratamiento de agua que son específicas para especies de un solo metal pueden identificarse rápidamente mediante el cribado de bibliotecas de nanorred.

Tabla 19. Eliminación de Zinc (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos No Iónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Zn ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
A1	1	Apo 10/DIBMA	10.07	11.6	15.3
A2	2	Apo 12/DIBMA	10.07	10.1	0.6
A3	3	Glucósido de Coco/DIBMA	10.07	11.5	13.7
A4	4	Genapol X080/DIBMA	10.07	11.2	10.8
A5	5	HEGMDDE-H370/DIBMA	10.07	11.7	16.1
A6	6	HEGMDE-H360/DIBMA	10.07	11.6	15.5
A7	7	HXEGMDDE-H375/DIBMA	10.07	11.7	16
A8	8	DDDM-MNA-C ₁₂ /DIBMA	10.07	11.2	11.6
A9	9	pGBTM-MNA-C ₁₃ /DIBMA	10.07	11.3	12.4
A10	10	pGBTEM-MNA-C ₁₄ /DIBMA	10.07	11.3	12.4
A11	11	nDDTTP-D342/DIBMA	10.07	11	9.1
A12	12	nDDTGP-D323/DIBMA	10.07	11.3	12.6
B1	13	OEGMDE-O330/DIBMA	10.07	10.5	4.7
B2	14	Poliglicerol-10-monolaurato/DIBMA	10.07	11.3	12.4
B3	15	Poliglicerol-10-monoleato/DIBMA	10.07	10.9	8.6
B4	16	Span 20™/DIBMA	10.07	10.4	3.8
B5	17	Triton X-100™/DIBMA	10.07	11	9.5
B6	18	Triton X-45™/DIBMA	10.07	11.9	18.3
B7	19	Tween 20™/DIBMA	10.07	10.7	6.2
B8	20	Tween 65™/DIBMA	10.07	10.7	6.1
B9	21	Tween 85™/DIBMA	10.07	10.6	5.4
B10	22	Apo 10/SMA 2000™	10.07	5.3	-47
B11	23	Apo 12/SMA 2000™	10.07	5.5	-45.1
B12	24	Glucósido de Coco/SMA 2000™	10.07	5	-50.2
C1	25	Genapol X080/SMA 2000™	10.07	5.2	-48.8
C2	26	HEGMDDE-H370/SMA 2000™	10.07	5.3	-47
C3	27	HEGMDE-H360/SMA 2000™	10.07	5.7	-43.1
C4	28	HEGMOE-H350/SMA 2000™	10.07	5.5	-45.8

Tabla 19. Eliminación de Zinc (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos No Iónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Zn ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
C ₅	29	HXEGMDDE-H375/SMA 2000™	10.07	4.6	-54.6
C ₆	30	pGBTM-MNA-C ₁₃ /SMA 2000™	10.07	5.5	-45.3
C ₇	31	pGBTEM-MNA-C ₁₄ /SMA 2000™	10.07	5	-50.5
C ₈	32	nDDDTTP-D342/SMA 2000™	10.07	5.1	-49.7
C ₉	33	nDDTGP-D323/SMA 2000™	10.07	5.2	-48
C ₁₀	34	nDDTP-D335/SMA 2000™	10.07	5.4	-46.4
C ₁₁	35	OEGMDE-O330/SMA 2000™	10.07	5.2	-48.4
C ₁₂	36	Poliglicerol-10-monolaurato/SMA 2000™	10.07	4.9	-51.8
DI	37	Poliglicerol-10-monooleato/SMA 2000™	10.07	4.7	-53.3
D2	38	Span 20/SMA 2000™	10.07	5.6	-44.7
D3	39	Triton X-100™/SMA 2000™	10.07	5.9	-41.4
D4	40	Triton X-305™/SMA 2000™	10.07	5	-50.4
D5	41	Triton X-45™/SMA 2000™	10.07	5	-50.7
D6	42	Tween 20™/SMA 2000™	10.07	5	-50.1
D7	43	Tween 40™/SMA 2000™	10.07	4.6	-54.2
D8	44	Tween 60™/SMA 2000™	10.07	5.1	-49
D9	45	Tween 65™/SMA 2000™	10.07	5.6	-44.3
D10	46	Tween 80™/SMA 2000™	10.07	9	-10.2
D11	47	Tween 85™/SMA 2000™	10.07	4.8	-52
D12	48	Apo 10/SMA 2021™	10.07	6.7	-33.4
E1	49	Apo 12/SMA 2021™	10.07	6.6	-34.1
E2	50	Glucósido de Coco/SMA 2021™	10.07	6.9	-31.9
E3	51	HEGMDDE-H370/SMA 2021™	10.07	7.2	-28.5
E4	52	HEGMDE-H360/SMA 2021™	10.07	7.2	-28.9
E5	53	HXEGMDDE-H375/SMA 2021™	10.07	7.2	-28.6
E6	54	pGBTM-MNA-C ₁₃ /SMA 2021™	10.07	7.3	-27.3
E7	55	pGBTEM-MNA-C ₁₄ /SMA 2021™	10.07	7.5	-26
E8	56	nDDTGP-D323/SMA 2021™	10.07	6.9	-31.6
E9	57	nDDDTTP-D342/SMA 2021™	10.07	7.2	-28.8
E10	58	OEGMDE-O330/SMA 2021™	10.07	6.8	-32.5
E11	59	Poliglicerol-10-monolaurato/SMA 2021™	10.07	8.2	-18.8
E12	60	Poliglicerol-10-monooleato/SMA 2021™	10.07	6.4	-36.2
F1	61	Triton X-100™/SMA 2021™	10.07	7.2	-28.4
F2	62	Triton X-45™/SMA 2021™	10.07	7	-30.7
F3	63	Tween 40™/SMA 2021™	10.07	7.8	-23
F4	64	Tween 60™/SMA 2021™	10.07	6.6	-34.4
F5	65	Tween 80™/SMA 2021™	10.07	7	-30.9

Tabla 19. Eliminación de Zinc (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos No Iónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Zn ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
F6	66	Tween 85™/SMA 2021™	10.07	7.1	-29.3
F7	67	Apo 10/SMA 3000™	10.07	10	-1
F8	68	Apo 12/SMA 3000™	10.07	11	8.9
F9	69	Glucósido de Coco/SMA 3000™	10.07	10.2	1
F10	70	Genapol X080/SMA 3000™	10.07	10.6	5.5
F11	71	HEGMDDE-H370/SMA 3000™	10.07	10.5	4.6
F12	72	HEGMDE-H360/SMA 3000™	10.07	11.5	14.5
G1	73	HXEGMDDE-H375/SMA 3000™	10.07	9.9	-1.2
G2	74	DDDM-MNA-C ₁₂ /SMA 3000™	10.07	11.1	10
G3	75	pGBTM-MNA-C ₁₃ /SMA 3000™	10.07	10.3	2.2
G4	76	pGBTEM-MNA-C ₁₄ /SMA 3000™	10.07	10.4	3
G5	77	nDDDT-P-D342/SMA 3000™	10.07	9.6	-4.8
G6	78	nDDTGP-D323/SMA 3000™	10.07	10.4	3.3
G7	79	OEGMDE-O330/SMA 3000™	10.07	10.7	6.1
G8	80	Poliglicerol-10-monolaurato/SMA 3000™	10.07	10.8	7
G9	81	Poliglicerol-10-monooleato/SMA 3000™	10.07	10.2	1.2
G10	82	Poliglicerol-10-monopalmitato/SMA 3000™	10.07	6.4	-36.5
G11	83	Span 20™/SMA 3000™	10.07	12.7	26.1
G12	84	Triton X-100™/SMA 3000™	10.07	6.6	-34.7
H1	85	Triton X-45™/SMA 3000™	10.07	11.2	10.8
H2	86	Tween 65™/SMA 3000™	10.07	5.8	-42.6
H3	87	Tween 85™/SMA 3000™	10.07	9	-10.2
H4	88	Apo 12/SMA-IBE	10.07	6.9	-31.9
H5	89	Glucósido de Coco/SMA-IBE	10.07	7	-30.4
H6	90	HEGMDDE-H370/SMA-IBE	10.07	7.2	-52.1
H7	91	HEGMDE-H360/SMA-IBE	10.07	6.2	-38.1
H8	92	HXEGMDDE-H375/SMA-IBE	10.07	7.5	-25.6
H9	93	nDDDT-P-D342/SMA-IBE	10.07	7.4	-26.8
H10	94	nDDTP-D335/SMA-IBE	10.07	6.5	-35.2
H11	95	Poliglicerol-10-monooleato/SMA-IBE	10.07	7.9	-21.3
H12	96	Triton X-45™/SMA-IBE	10.07	8.5	-15.5
A1	97	Tween 85™/SMA-IBE	10.07	7	-30.2
A2	98	Genapol X080/SMA 725™	10.07	4.6	-53.9
A3	99	nDDDT-P-D342/SMA 725™	10.07	6.9	-31.9
A4	100	nDDTGP-D323/SMA 725™	10.07	4.2	-58.2
A5	101	Poliglicerol-10-monooleato/SMA 725™	10.07	5.1	-49.3
A6	102	Span 20™/SMA 725™	10.07	4.8	-52.8

Tabla 19. Eliminación de Zinc (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos No Iónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Zn ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
A7	103	HEGMDDE-H370/SMA 725™	10.07	7.1	-29.3
A8	104	HEGMDE-H360/SMA 725™	10.07	7.1	-29.5
A9	105	HXEGMDDE-H375/SMA 725™	10.07	8.2	-18.3
A10	106	pGBTEM-MNA-C ₁₄ /SMA 725™	10.07	7.7	-23.5
A11	107	Poliglicerol-10-monopalmitato/SMA 725™	10.07	7.3	-27.2
A12	108	Triton X-100™/SMA 725™	10.07	6.7	-33.4
B1	109	Triton X-45™/SMA 725™	10.07	6.8	-32.5
B2	110	Tween 65™/SMA 725™	10.07	6.8	-32.5
B3	111	Tween 80™/SMA 725™	10.07	7.2	-28.1
B4	112	Apo 10/SMA Cumene	10.07	5.4	-46.7
B5	113	Apo 12/SMA Cumene	10.07	6	-40.8
B6	114	PFDMP-O310F/SMA Cumene	10.07	6.1	-39.1
B7	115	Genapol X080/SMA Cumene	10.07	5.3	-47.7
B8	116	HEGMDDE-H370/SMA Cumene	10.07	5.8	-42.1
B9	117	HEGMDE-H360/SMA Cumene	10.07	5.4	-46.1
B10	118	HXEGMDDE-H375/SMA Cumene	10.07	4.9	-51.8
B11	119	DDDM-MNA-C ₁₂ /SMA Cumene	10.07	5.6	-44
B12	120	pGBTM-MNA-C ₁₃ /SMA Cumene	10.07	6.1	-39.2
C1	121	nDDTTP-D342/SMA Cumene	10.07	5.6	-44.6
C2	122	nDDTGP-D323/SMA Cumene	10.07	5.2	-48
C3	123	nDDTP-D335/SMA Cumene	10.07	5.9	-41.8
C ₄	124	OEGMDE-O330/SMA Cumene	10.07	7.1	-29.7
C ₅	125	Poliglicerol-10-monolaurato/SMA Cumene	10.07	6.4	-36.8
C ₆	126	Poliglicerol-10-monooleato/SMA Cumene	10.07	5.7	-43.7
C ₇	127	Span 20™/SMA Cumene	10.07	4.6	-54.2
C ₈	128	Triton X-100™/SMA Cumene	10.07	5.4	-46.2
C ₉	129	Triton X-45™/SMA Cumene	10.07	8.4	-16.7
C ₁₀	130	Tween 65™/SMA Cumene	10.07	7.3	-27.4
C11	131	Tween 85™/SMA Cumene	10.07	6.8	-32.4

Tabla 20. Eliminación de Zinc (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos Aniónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Zn ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
A1	1	Stepan Bio-Soft D-40™/DIBMA	10.07	10.3	2.2
A2	2	Lakeland PAE 136™/DIBMA	10.07	10.5	4.1
A3	3	Stepan Lathanol LAL™/DIBMA	10.07	10.2	1.2
A4	4	n-Decanoil-L-Treonina/DIBMA	10.07	10.9	8.1

Tabla 20. Eliminación de Zinc (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos Aniónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Zn ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
A5	5	n-Dodecanoil-L-Treonina/DIBMA	10.07	10.5	3.8
A6	6	n-Decanoil-L-Metionina/DIBMA	10.07	9.6	-4.6
A7	7	n-Dodecanoil-L-Metionina/DIBMA	10.07	10.6	5.5
A8	8	Ninate 411™/DIBMA	10.07	10.7	6
A9	9	n-Octanoil-L-Metionina/DIBMA	10.07	10.8	7.1
A10	10	Stepan Mild L3™/DIBMA	10.07	11	9.5
A11	11	Stepan Bio-Terge AS-40 ™/SMA 2000™	10.07	7.8	-22.7
A12	12	Stepan Bio-Soft D-40™/SMA 2000™	10.07	8	-20.5
B1	13	Sal sódica de ácido dodecano-1-sulfónico/SMA 2000™	10.07	7.7	-23.2
B2	14	Lakeland PAE 136™/SMA 2000™	10.07	7.9	-21.4
B3	15	Stepan Lathanol LAL™/SMA 2000™	10.07	7.3	-27.1
B4	16	n-Decanoil-L-Metionina/SMA 2000™	10.07	7.6	-24.1
B5	17	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA 2000™	10.07	8	-20.8
B6	18	n-Decanoil-L-Treonina/SMA 2000™	10.07	7.2	-28.7
B7	19	n-Dodecanoil-L-Histidina/SMA 2000™	10.07	3.6	-64.1
B8	20	Stepan Mild L3™/SMA 2000™	10.07	8.2	-18.8
B9	21	n-Dodecanoil-L-Treonina/SMA 2000™	10.07	8.2	-18.9
B10	22	Dodecylbencenosulfonato de sodio/SMA 2000™	10.07	7.3	-27.6
B11	23	Ninate 411™/SMA 2000™	10.07	8.2	-18.2
B12	24	Stepan SLL-FB™/SMA 2000™	10.07	7.5	-25.9
C1	25	Stepan Sulfonic Acid™/SMA 2000™	10.07	8.1	-20
C2	26	Sal sódica de ácido dodecano-1-sulfónico/SMA 2021™	10.07	7.3	-27.9
C3	27	Lakeland PAE 136™/SMA 2021™	10.07	6.4	-36.5
C ₄	28	Stepan Lathanol LAL™/SMA 2021™	10.07	7.3	-27.6
C ₅	29	n-Decanoil-L-Metionina/SMA 2021™	10.07	7.2	-28.4
C ₆	30	Cedepal TD-403 MFLD™/SMA 2021™	10.07	7.1	-29
C ₇	31	Stepan Mild L3™/SMA 2021™	10.07	7.7	-23.6
C ₈	32	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA 2021™	10.07	11.3	12.6
C ₉	33	n-Decanoil-L-Metionina/SMA 3000™	10.07	11.8	16.9
C₁₀	34	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA 3000™	10.07	10.9	8.5
C11	35	n-Decanoil-L-Treonina/SMA 2021™	10.07	7.6	-24.4
C ₁₂	36	n-Dodecanoil-L-Treonina/SMA 2021™	10.07	8.1	-19.7
D1	37	Dodecylbencenosulfonato de sodio/SMA 2021™	10.07	7.7	-23.8

Tabla 20. Eliminación de Zinc (Se Utilizó 40 µl de Solución Madre de Biblioteca de Nanorred) con Nanorred con Tensioactivos Aniónicos					
Pocillo N°	Biblioteca N°	Ítem de Biblioteca de Nanorred	Zn ²⁺ Añadido [ppm]	Medido [ppm]	% de Diferencia
D2	38	Ninate 411™/SMA 2021™	10.07	8.3	-17.5
D3	39	Stepan SLL-FB™/SMA 2021™	10.07	8.6	-14.1
D4	40	Stepan Sulfonic Acid™/SMA 2021™	10.07	8.7	-13.9
D5	41	Lakeland PAE 136™/SMA 3000™	10.07	11.1	9.8
D6	42	n-Dodecanoil-L-Treonina/SMA 3000™	10.07	10.5	4.5
D7	43	Ninate 411™/SMA 3000™	10.07	11.4	12.8
D8	44	Stepan Mild L3™/SMA 3000™	10.07	11.4	12.9
D9	45	Stepan SLL-FB™/SMA 3000™	10.07	11	8.7
D10	46	Stepan Sulfonic Acid™/SMA 3000™	10.07	11.9	17.8
D11	47	n-Decanoil-L-Metionina/SMA-IBE	10.07	9.2	-8.3
D12	48	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA-IBE	10.07	8.2	-19
E1	49	Stepan Mild L3™/SMA-IBE	10.07	7.1	-29.6
E2	50	Stepan SLL-FB™/SMA-IBE	10.07	6.2	-37.9
E3	51	Amin GCK30H/SMA 725™	10.07	5.7	-43.8
E4	52	Stepan Bio-Terge AS-40™/SMA 725™	10.07	6.7	-33.5
E5	53	n-Dodecanoil-L-Histidina/SMA 725™	10.07	3.4	-66.6
E6	54	Stepan Lathanol LAL™/SMA 725™	10.07	6.6	-34.3
E7	55	n-Decanoil-L-Metionina/SMA 725™	10.07	6.8	-32.7
E8	56	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA 725™	10.07	5.8	-42.2
E9	57	Sal sódica de ácido dodecano-l-sulfónico/SMA 725™	10.07	5.7	-43.5
E10	58	Lakeland PAE 136™/SMA725™	10.07	5.9	-41.8
E11	59	n-Dodecanoil-L-Treonina/SMA 725™	10.07	6.4	-36.7
E12	60	Stepan Mild L3™/SMA 725™	10.07	7.9	-22
F1	61	Stepan SLL-FB™/SMA 725™	10.07	5.7	-43
F2	62	Lakeland PAE136/SMA Cumene	10.07	5.9	-41.3
F3	63	n-Dodecanoil-L-Treonina/SMA Cumene	10.07	5.9	-41
F4	64	Stepan Mild L™3/SMA Cumene	10.07	6.1	-39.1
F5	65	Stepan SLL-FB™/SMA Cumene	10.07	5.5	-45
F6	66	n-Decanoil-L-Metionina/SMA Cumene	10.07	6.4	-36.2
F7	67	n-Dodecanoil-L-Metionina/SMA Cumene	10.07	7.2	-28.6
F8	68	n-Dodecanoil-L-Histidina/SMA Cumene	10.07	5.5	-45.4

Ejemplo 23

Formación de nanorred utilizando un polímero SMA

derivatizado.

[00328] Para demostrar que los grupos funcionales hidrófilos alternativos se pueden utilizar para fabricar nanorredes, se derivatizó SMA-2000™ haciendo reaccionar el anhídrido con etanolamina. El polímero resultante pudo formar complejos con los tres.

[00329] Los tensioactivos de la serie Triton (TX-100™, TX-305™, TX-45™), confirmando que los polímeros derivatizados con grupos funcionales hidrófilos alternativos también se pueden utilizar para formar nanorredes.

[00330] La serie Triton™ X se tituló en un intervalo de concentración de 1000-0 ppm con polímero SMA 2000™ derivatizado a una concentración de 200 ppm; nanorred activada con 10µL de HCl µL

Tabla 21. Prueba de Eficiencia de Formación de Nanorred con Tensioactivos de la Serie Triton™ y SMA-725™, SMA-2000™				
Tensioactivo	Polímero [400PPM]	Concentración [PPM]	Absorbancia de Nanorred [280 nm]	Absorbancia de Control [280 nm]
Triton X100™	SMA 2000™	1000	0.2253	1.1656
Triton X100™	SMA 2000™	500	0.1728	0.5988
Triton X100™	SMA 2000™	250	0.1571	0.3206
Triton X100™	SMA 2000™	100	0.0768	0.1449
Triton X100™	SMA 2000™	64.8	0.0773	0.1257
Triton X100™	SMA 2000™	0	0.0619	0.0516
Triton X100™	SMA 725™	1000	1.2527	1.1345
Triton X100™	SMA 725™	500	1.549	0.5752
Triton X100™	SMA 725™	295.16	0.172	0.3518
Triton X100™	SMA 725™	250	0.1353	0.302
Triton X100™	SMA 725™	100	0.0698	0.1394
Triton X100™	SMA 725™	0	0.0511	0.1441
Triton X45™	SMA 2000™	1000	0.1186	1.4812
Triton X45™	SMA 2000™	616.18	0.0973	0.8388

Tabla 21. Prueba de Eficiencia de Formación de Nanorred con Tensioactivos de la Serie Triton™ y SMA-725™, SMA-2000™

Tensioactivo	Polímero [400PPM]	Concentración [PPM]	Absorbancia de Nanorred [280 nm]	Absorbancia de Control [280 nm]
Triton X45™	SMA 2000™	500	0.1049	0.7703
Triton X45™	SMA 2000™	250	0.0783	0.4892
Triton X45™	SMA 2000™	100	0.0654	0.1734
Triton X45™	SMA 2000™	0	0.0707	0.0518
Triton X45™	SMA 725™	1000	0.1837	1.6766
Triton X45™	SMA 725™	500	0.128	1.3428
Triton X45™	SMA 725™	250	0.1147	0.785
Triton X45™	SMA 725™	100	0.0703	0.3648
Triton X45™	SMA 725™	92.92	0.1003	0.3679
Triton X45™	SMA 725™	0	0.0552	0.0502

Tabla 22. Formación de Nanorred con Tensioactivo de la Serie Triton™ y SMA-2000™ Derivado de Etanolamina

Tensioactivo	Concentración Tensioactivo [ppm]	Control	SMA-2000™ derivado de etanolamina
		(Absorbancia a 540 nm)	(Absorbancia a 540 nm)
Triton X-100™	1000	0.0474	0.0689
Triton X-100™	500	0.0473	0.1056
Triton X-100™	250	0.0471	0.1909
Triton X-100™	125	0.048	0.1271
Triton X-100™	50	0.0474	0.0843
Triton X-100™	0	0.0406	0.0616
Triton X-305™	1000	0.0484	0.0493
Triton X-305™	500	0.0475	0.076
Triton X-305™	250	0.0467	0.0843
Triton X-305™	125	0.0462	0.0746
Triton X-305™	50	0.0444	0.0716
Triton X-305™	0	0.0408	0.0664
Triton X-45™	1000	0.6694	0.7939
Triton X-45™	500	0.309	0.8672
Triton X-45™	250	0.1338	0.9615
Triton X-45™	125	0.0951	1.0042
Triton X-45™	50	0.0517	0.116
Triton X-45™	0	0.0388	0.0636

Ejemplo 24

Efecto del polímero sobre la velocidad de sedimentación de flóculos de nanorredes.

Protocolo experimental

[00331] Se añaden 3 ml de una solución de 4000 ppm de Ca^{2+} preparada a partir de cloruro de calcio (83%-87%, Downflake) a un vial de Eppendorf.

Tabla 23: Información Sobre Polímeros Usados en Este Conjunto de Experimentos.		
Nombre del Polímero	Peso Molecular [kDa]	Proporción de Estireno a Anhídrido Maleico
SMA-725™	130	3:1
SMA-2000™	7.5	2:1
SMA-3000™	9.5	3:1

[00332] El complejo de nanorredes de polímero-tensioactivo se prepara añadiendo una solución de polímero al 2% a una solución de tensioactivo al 1% en una relación de polímero a tensioactivo de 2,5:1. Para unir las nanorredes a los iones de calcio libres, se añaden 100 μL de la mezcla de polímero-tensioactivo (97 ppm de tensioactivo, 473 ppm de polímero) a la solución de calcio, después de lo cual se pueden ver flóculos blancos transparentes en la solución.

[00333] Para probar el efecto de añadir polímero solo, se añaden 71 μL de la solución de polímero al 2% (473 ppm de polímero) a la solución de calcio.

[00334] La mezcla se agita a 600 RPM (agitación ligera) durante un minuto. Una ligera agitación asegura que la ruptura de los flóculos se minimice durante la mezcla, ya que esto aumentaría el tiempo requerido para la sedimentación del lote.

[00335] La cubeta de cuarzo que se utiliza para contener la muestra debe limpiarse cinco veces con agua desionizada (DI) y secarse a mano con un kimwipe hasta que las caras exteriores estén secas y ópticamente limpias.

[00336] Después de un minuto de mezcla, la suspensión floculada se transfiere inmediatamente a una cubeta de cuarzo limpia, después de lo cual se inicia el lapso de tiempo. Los videos se toman a una frecuencia de 0,2 Hz durante 25 minutos.

Cálculo de los parámetros de sedimentación de lotes

[00337] Se escribió un script de Python para rastrear el asentamiento de los flóculos. La región de interés (ROI) se tomó como el área del lecho de flóculos después de 25 minutos de sedimentación. Para hacer esto, se selecciona manualmente una caja que abarca las paredes internas de la cubeta y la parte inferior del menisco.

[00338] A partir de aquí, una rutina de procesamiento de imágenes extrae automáticamente la posición de la interfaz entre la fase líquida clara y el lecho consolidado después de la sedimentación. Se puede calcular la altura del lecho consolidado y se puede generar un nuevo ROI de la región de sedimentación para un análisis posterior.

[00339] Dentro de este nuevo ROI, se puede calcular una intensidad de píxel en escala de grises promedio a lo

largo del tiempo; los flóculos son de color blanco (en contraste con un fondo de color negro oscuro) por lo que se espera que este valor aumente durante la sedimentación. Este valor se puede interpretar como la cantidad de sedimento de flóculos en el fondo de la cubeta.

[00340] Para generar un único parámetro cuantificable de interés a partir de una serie de imágenes que siguen la sedimentación, se ajusta una función sigmoidea a los datos de sedimentos de flóculos aparentes.

[00341] Un ejemplo de este ajuste de curva de la sedimentación aparente se ilustra en la Figura 26.

[00342] Después del ajuste de la curva, se puede informar un valor t_{50} (centro de sigmoide) que sirve como indicador de la velocidad de asentamiento. Dependiendo de la naturaleza de la separación de fases, esto también puede servir como indicador del tamaño del flóculo (sedimentación más rápida = menor t_{50}).

Resultados

La selección del polímero influye directamente en la velocidad de sedimentación

[00343] En la Figura 27 se ilustra un gráfico del t_{50} para los tres polímeros.

[00344] Es evidente que la velocidad de sedimentación se ve afectada directamente por la selección del polímero. SMA-725™ tiene el peso molecular más alto y

se espera que esto se resuelva más rápido por esta razón.

[00345] Existe una diferencia en la velocidad de sedimentación entre los diferentes polímeros SMA-725™ y SMA-3000™. En general, el polímero más largo se sedimenta significativamente más rápido que los polímeros más cortos (SMA-725™ > SMA-2000™/3000™). Sin embargo, SMA-2000™ se asienta más rápido que SMA-3000™ en estos experimentos, a pesar de que SMA-2000™ es un polímero ligeramente más corto. Esta falta de correlación entre la longitud del polímero y la velocidad de asentamiento sugiere que existen propiedades adicionales del polímero que pueden influir en el comportamiento de separación de fases de las nanorredes más allá de la longitud del polímero. Este ensayo sugiere que el diseño eficiente de nanorred requiere algo más que un gran agregado de tensioactivo y un pequeño polímero; El tamaño del polímero y la identidad química también afectarán significativamente la eliminación de nanorred en los procesos de tratamiento de aguas residuales.

Ejemplo 25

Preparación y caracterización de nanorred Fe:

[00346] Se calentaron 100 l de una solución madre 1,5 M de KOH a 95 °C. A esta solución, se le añadieron 10 kg de SMA 725 premolido con una mezcla vigorosa. La solución se dejó hidrolizar durante 3 horas, momento en el que se bombearon 4 kg de ácido oleico a la mezcla. La

solución se dejó mezclar a 95 °C. Después de 1 hora, se añadieron a la mezcla 10 l de una solución de poliglicerol-10-estearato precalentada al 20%. Se dejó enfriar la solución a 60°C mientras se continuaba mezclando, momento en el cual la solución se bombeó a través de un filtro de 1 micra para eliminar cualquier polímero no hidrolizado. A continuación, se añadió a la solución agua destilada o desionizada para compensar cualquier pérdida por evaporación.

[00347] Se prepararon 11 lotes de nanorred Fe como se describe y se midió el diámetro de partícula y la viscosidad de cada lote. Los lotes de nanorred se registraron en la Tabla 24 a continuación. El diámetro de las partículas se midió mediante la dispersión dinámica de la luz en un Malvern NanoZS y se calculó a partir de los valores de intensidad. La viscosidad se midió en un reómetro Brookfield VII a 23 °C.

Tabla 24: Características de una solución de nanorred Fe al 10%		
Lote #	Tamaño (nm)	Viscosidad (Cp)
1	10.15	14
2	9.89	18
3	11.31	18
4	11.99	18
5	10.9	20
6	6.67	18
7	13.02	12
8	8.89	16
9	8.72	16

Tabla 24: Características de una solución de nanorred Fe al 10%		
Lote #	Tamaño (nm)	Viscosidad (Cp)
10	9.12	14
11	10.15	20

Ejemplo 26

Tratamiento de agua producida con nanorred fe en un proceso de tratamiento de agua

[00348] En el siguiente ejemplo, el agua producida procedente de Permian Basin en Texas, Estados Unidos se trató con nanorred Fe, Lote 7, del Ejemplo 25.

[00349] El agua producida entrante se bombeó a un caudal de 4 GPM desde los contenedores WOOL a través de un eductor venturi 484 Mazzei. Se dosificaron 50 ppm de nanorredes en el eductor, junto con la adición simultánea de aire a aproximadamente 3 l/min. El agua viajó a través de un tanque de reacción y luego a un circuito de floculación. Luego, el agua ingresó a una unidad de flotación de aire disuelto, donde los complejos de nanorred-hierro flotaron hacia la superficie y se eliminaron del agua. Los niveles de hierro, turbidez, sólidos disueltos totales, potencial oxidativo reductor y alcalinidad mostrados en las Figuras 28A-28E.

Ejemplo 27

Tratamiento del agua producida con nanonet fe en un proceso de tratamiento de agua con adición de floculante

aniónico.

[00350] El agua producida entrante se bombeó a un caudal de 8 GPM a través de un eductor venturi 784 Mazzei. Se dosificaron activamente 30 ppm de nanorred Fe, Lote 11, del Ejemplo 25 usando una bomba peristáltica en un eductor venturi. El fluido tratado luego fluyó a un tanque de mezcla, que fue aireado débilmente por un burbujeo de reciclaje proveniente del flujo de salida del tren de tratamiento. Para ayudar a la captura de hierro, el tanque de mezcla se mezcló rápidamente usando un mezclador dinámico de alto cizallamiento. El fluido tratado salió del tanque de mezcla, momento en el que se dosificó con 1 ppm de un floculante aniónico. A continuación, el fluido tratado pasó a través de una serie de cámaras de mezcla de alta y baja velocidad para mejorar el desmoldeo del floculante y la floculación de los complejos de nanorred-hierro. Posteriormente, el fluido tratado entró en una cámara de flotación y los flóculos flotaron hacia la superficie mediante la adición de aire disuelto. El efluente final sale del DAF a través de una serie de vertederos y se bombea a través de un filtro de pulido final con un tamaño de poro promedio de 20 micrones. Los niveles de hierro y bacterias entrantes y salientes del tratamiento del agua con este proceso se muestran en las Tablas 25 y 26 a continuación.

Tabla 25: Concentraciones de hierro (ppm) después del tratamiento del agua producida con nanorred.								
	Día 1		Día 2		Día 3		Día 4	
	Prom.	Desv. Est.	Prom.	Desv. Est.	Prom.	Desv. Est.	Prom.	Desv. Est.
Afluente	14.4	0.53	18.2	2.70	33.48	10.38	36.08	12.07
Post-DAF	0.67	0.10	1.49	1.50	0.99	0.50	2.62	1.62
Post-Filtro	0.24	0.42	0.1	0.17	0	0	0.42	0.67

Tabla 26: Niveles de ATP (pg/ml) de agua producida antes y después del tratamiento con nanorred Fe en un tren de tratamiento de proceso de flotación por aire disuelto						
	Prueba 1			Prueba 2		
Afluente	2697			3724		
Post-DAF	111	137	449	330	100	86
Post-Filtro	130	10	259	129	27	25

Ejemplo 28

Reducción de la demanda oxidativa mediante la adición de nanorred Fe.

[00351] Es probable que la demanda global de productos químicos oxidantes en el tratamiento del agua en las operaciones de los campos petrolíferos se reduzca mediante la eliminación del hierro ferroso de la solución. Para probar esta hipótesis, se trató una solución de hierro ferroso con y sin nanorredes, seguida de clorito de sodio. Las soluciones se filtraron y luego el filtrado se dosificó con una cantidad fija de dióxido de cloro. Cantidades crecientes de nanorredes conducen a un aumento sustancial del oxidante residual, lo que demuestra la eliminación de la demanda oxidativa en el sistema.

[00352] Las figuras 29A y 29B muestran una comparación lado a lado de la eliminación de hierro con

nanorredes, repetidas. El agua producida suplementada con 50 ppm de Fe^{2+} , se trató primero con NaClO_2 a la concentración indicada, luego se trató secuencialmente con la dosis indicada de Nanonet Fe (0, 10, 20, 40 ppm como barras cada vez más ligeras). Las soluciones se mezclaron por inversión y se dejaron reposar durante 5 minutos a temperatura ambiente (sin aireación). Las soluciones resultantes se filtraron por gravedad (filtro de celulosa de 10 micrómetros) y se analizó el contenido de hierro de una muestra del filtrado resultante mediante el ensayo de ferrozina (A). Posteriormente se trató el filtrado con 25 ppm de ClO_2 y se dejó incubar durante 5 minutos, transcurridos los cuales se midió el ClO_2 residual (B).

[00353] Aunque en el presente documento se describen varias realizaciones de la invención, se pueden realizar muchas adaptaciones y modificaciones dentro del alcance de la invención de acuerdo con el conocimiento general común de los expertos en esta técnica. Tales modificaciones incluyen la sustitución de equivalentes conocidos para cualquier aspecto de la invención con el fin de lograr el mismo resultado sustancialmente de la misma manera. Los rangos numéricos incluyen los números que definen el rango. Además, se proporcionan rangos numéricos de modo que el rango de valores se enumera además de que los valores individuales dentro del rango enumerado se enumeran

específicamente en ausencia del rango. La palabra "que comprende" se usa en este documento como un término abierto, sustancialmente equivalente a la frase "que incluye, pero no se limita a", y la palabra "comprende" tiene un significado correspondiente. Como se usa aquí, las formas singulares "un", "una" y "el" incluyen referencias en plural a menos que el contexto indique claramente lo contrario. Así, por ejemplo, la referencia a "una cosa" incluye más de una de esas cosas. La citación de referencias en este documento no es una admisión de que tales referencias sean técnica anterior a la presente invención. Además, el material que aparece en la sección de antecedentes de la especificación no es una admisión de que dicho material sea de la técnica anterior a la invención. Cualquier documento o documentos de prioridad se incorporan en este documento como referencia como si cada documento de prioridad individual se indicara específica e individualmente para incorporarse como referencia en el presente documento y como si se estableciera completamente en el presente documento. La invención incluye todas las realizaciones y variaciones sustancialmente como se describió anteriormente y con referencia a los ejemplos y dibujos.