



INVITACIÓN

Se invita a los Docentes y Alumnos al examen preliminar del alumno del Programa de Doctorado en Ciencias de la Ingeniería c/m en Ingeniería Química, **Sr. Diego Becerra Riquelme**.

Antes de iniciar formalmente su trabajo de tesis, todo alumno de magíster o doctorado deberá rendir un examen preliminar que consta de dos partes:

- i) La defensa del proyecto de tesis consiste en la presentación, fundamentación y defensa del proyecto de investigación que el candidato se propone realizar como tesis de grado.
- ii) Un examen de calificación basado en el conocimiento y habilidades adquiridos en la etapa de cursos y en la defensa del proyecto de tesis.

El título del proyecto de tesis es “**Estudio molecular de los efectos de una matriz polimérica sobre flujo de agua a través de nanotubos de carbono**”, patrocinado por los Profesores Harvey Zambrano R. y Andrés Córdoba U.

En la defensa del Proyecto de Tesis el candidato somete sus objetivos, métodos y trabajos preliminares al examen y a la crítica constructiva de los docentes y estudiantes del Programa de Postgrado. Por ello su presencia, y sobre todo su participación en esta actividad serán apreciadas.

La exposición se llevará a cabo en la siguiente fecha y horario:

Fecha : Martes 09 de enero de 2018.

Hora : 15.00 hrs.

Lugar : Auditorio Prof. Hugo Segura Gómez, 2do piso, Edificio Gustavo Pizarro Castro.

Atentamente,

Romel Jiménez Concepción
DIRECTOR
PROGRAMA DE GRADUADOS
DEPTO. DE INGENIERÍA QUÍMICA

Concepción, 02 de enero de 2018.

RJC/pmc.
Incl.: resumen



Resumen

La tendencia en ingeniería a la reducción permanente de los sistemas tecnológicos para ganar portabilidad, reducir costos energéticos y aumentar la rapidez de respuesta sumada a la reciente capacidad de manipular la materia a escala molecular está llevando al desarrollo de microdispositivos, tales como unidades lab-on-a-chip. En la actualidad, el paso siguiente es reducir el tamaño de estos dispositivos a la nanoescala. Separaciones de sustancias a escala de moléculas individuales son requeridas en tales sistemas, esto ha impulsado el desarrollo de membranas nanoporosas basadas en nanotubos de carbono (CNTs), los cuales en virtud de sus excepcionales propiedades, constituyen excelentes materiales para aplicaciones de tamizado molecular. Centramos nuestros estudios en la comprensión del flujo de fluidos a través de membranas de nanotubos de carbono verticalmente alineados rodeados por una matriz polimérica flexible y los efectos que esta matriz de soporte induce sobre el flujo a través de los nanotubos de carbono. Simulaciones de dinámica molecular (MD) son conducidas para llevar a cabo un estudio exhaustivo de los sistemas de interés. En las simulaciones de dinámica molecular, los potenciales de interacción entre los átomos determinan la dinámica y la física del sistema que se investiga. Primero que todo, han sido implementados campos de fuerza a partir de literatura para interacciones agua-agua, carbono-carbono y agua-carbono. Posteriormente, desarrollamos un modelo atomístico de una matriz de poliamida utilizando un enfoque heurístico que reproduce características tales como una densidad de 1.3 g/cm^3 , una estructura y un grado de reticulación (DC) de acuerdo con las características de una poliamida real. Las interacciones de la poliamida con las moléculas de agua se calibraron mediante mediciones de ángulo de contacto comparando con valores reportados en literatura experimental. En una segunda parte de este estudio, después de tener una descripción correcta del sistema, realizaremos simulaciones de dinámica molecular de flujo de agua a través de nanotubos de carbono soportados por una matriz polimérica, con el fin de optimizar el sistema y evaluar su potencial impacto en aplicaciones de tamizado molecular.