

Molecular Study of the Effects of a Polymeric Matrix Support on the Flow of Water Through Carbon Nanotubes

Abstract

Progress in the areas of nanotechnology and fluid mechanics, are shaping up to be a major driving force behind the impending technological revolution in the 21st century. Novel nanofabrication techniques have opened up possibilities for the development of small-scale integrated devices, such as lab-on-a-chip, which consist of the integration of one or several laboratory functions on a single chip. The dimensions of these devices reach the sub-micron range, therefore, the applications derived from these systems belong to the nanofluidics field. High resolution separations of some molecules are required in such systems, this has encouraged the development of nanoporous membranes based on carbon nanotubes (CNTs), which, by virtue of their exceptional properties, constitute excellent materials for molecular sieving applications. We focus our studies on the understanding of fluid flow at the nanoscale through membranes of vertically aligned carbon nanotubes surrounded by a flexible polymeric matrix of polyamide and the effects that the matrix support induces on the flow through carbon nanotubes.

Molecular dynamics (MD) simulations are carried out for a systematic study of the system of interest. In molecular dynamics simulations, the interaction potentials between atoms determine the dynamics and physics of the system under investigation. First of all, force fields have been implemented from literature for water-water, carbon-carbon and water-carbon interactions. Subsequently, we develop an atomistic model of a polyamide matrix using a heuristic approach, which reproduces characteristics such as density, structure and degree of crosslinking (DC) in good agreement with the characteristics of a real polyamide. The interactions of polyamide with water molecules are being calibrated by water contact angle measurements against experimental data. In a second part of this study, after having a correct description of the system, we will perform molecular dynamics simulations of water flow through polymer-supported carbon nanotubes, in order to optimize the system and its potential impact in molecular sieving applications.

Resumen

El progreso en las áreas de la nanotecnología y la mecánica de fluidos se está perfilando como una importante fuerza motriz detrás de la inminente revolución tecnológica en el siglo XXI. Las nuevas técnicas de nanofabricación han abierto las posibilidades para el desarrollo de dispositivos integrados a pequeña escala, tales como lab-on-a-chip, los cuales consisten en la integración de una o varias funciones de laboratorio en un solo chip. Las dimensiones de estos dispositivos alcanzan el rango submicrónico, por lo tanto, las aplicaciones derivadas de estos sistemas pertenecen al campo de la nanofluídica. Se requieren separaciones de alta resolución de algunas moléculas en tales sistemas, esto ha fomentado el desarrollo de membranas nanoporosas basadas en nanotubos de carbono (CNT), que, en virtud de sus propiedades excepcionales, constituyen materiales excelentes para aplicaciones de tamizado molecular. Centramos nuestros estudios en la comprensión del flujo de fluidos a nanoescala a través de membranas de nanotubos de carbono verticalmente alineados rodeados por una matriz polimérica flexible de poliamida y los efectos que la matriz de soporte induce en el flujo a través de nanotubos de carbono. Simulaciones de dinámica molecular (MD) son llevadas a cabo para un estudio sistemático del sistema de interés. En las simulaciones de dinámica molecular, los potenciales de interacción entre los átomos determinan la dinámica y la física del sistema bajo investigación. En primer lugar, los campos de fuerza se han implementado a partir de literatura para las 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 densidad, estructura y grado de reticulación en buen acuerdo con las características de una poliamida real. Las interacciones de la poliamida con las moléculas de agua se calibran mediante mediciones del ángulo de contacto del agua contra los datos experimentales. En una segunda parte de este estudio, después de tener una descripción correcta del sistema, realizaremos simulaciones de dinámica molecular del flujo de agua a través de nanotubos de carbono soportados por la matriz polimérica, con el fin de optimizar el sistema y su impacto potencial en aplicaciones de tamizado molecular.