



UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN  
FACULTAD DE INGENIERÍA  
PROGRAMAS DE POSTGRADO  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



***“Dinámica molecular de interfases entre óxidos minerales y agua en presencia de electrolitos y polielectrolitos a alta concentración de sal y en un rango de pH”***

Tesis presentada a la

DIRECCIÓN DE POSTGRADO DE LA UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN

para optar al ***Grado de Doctorado en Cs. de la Ingeniería con mención en Ingeniería Química***

Dr. Romel Jiménez Concepción, Director del Programa de Graduados en Ciencias de la Ingeniería, con mención en Ingeniería Química, saluda atentamente y tiene el agrado de invitarle al Examen de Grado del ***Sr. Gonzalo Renato Quezada Escalona***, que se efectuará en el Auditorio Prof. Hugo Segura Gómez, 2do piso, Edificio Gustavo Pizarro Castro, el día miércoles 17 de enero a las 15.00 hrs.

Profesor Guía:

*Pedro Toledo R.*, Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción.

Profesor Co-Guía:

*Roberto Rozas C.*, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad del Bío Bío.

Profesor Comisión Interna:

*Andrés Mejía M.*, Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción.

Profesor Comisión Externa:

*Dino Risso R.*, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad del Bío Bío.

Concepción, 12 de Enero de 2018.

## RESUMEN

El comportamiento interfacial de sílica-agua y alúmina-agua determina la eficiencia de un gran número de procesos industriales en que participan estos minerales. Tal comportamiento puede ser modificado no solo mediante activación de las superficies involucradas con sales sino mediante la adsorción de surfactantes, polímeros y sus mezclas. Interrogantes sobre qué polímero agregar y cuánto agregar generalmente no tienen respuestas fáciles porque la efectividad del polímero depende de múltiples factores y muy especialmente del pH cuando determina el grado de hidrólisis de la superficie mineral y del polímero, o sea la carga eléctrica sobre las superficies que interactúan, también depende de la concentración y peso molecular del polímero. Las decisiones sobre el polímero a usar se adoptan finalmente en terreno y se evalúan en base a los rendimientos que se obtengan. Una dificultad adicional se relaciona con la presencia de electrolitos que alteran las superficies tanto de las partículas minerales como del polímero. Este escenario es cada vez más común debido a que la escasez de agua fresca en un número creciente de regiones está empujando el uso de agua de mar tal cual o parcialmente desalada. Dilucidar lo que ocurre en la interfaz entre minerales eléctricamente cargados y agua en presencia de polímeros y electrolitos en alta concentración requiere de una aproximación molecular para lo cual simulaciones de dinámica molecular (DM) son particularmente adecuadas. En particular existe una amplia literatura sobre simulaciones moleculares de la interfaz cuarzo-agua, y una literatura bastante más modesta en número sobre simulaciones moleculares de HPAM en soluciones acuosas de electrolitos y sobre simulaciones moleculares de adsorción de HPAM sobre cuarzo en agua. La gran mayoría de estos estudios ha sido desarrollada en ausencia de sales. La investigación informada en esta tesis es parte de un programa amplio en la Universidad de Concepción – en el Departamento de Ingeniería Química (DIQ) y en el Centro de Recursos Hídricos para la Agricultura y la Minería (CRHIAM) – para avanzar la comprensión de fundamentos fisicoquímicos que gobiernan la interacción de minerales con agua en presencia de electrolitos, surfactantes y polielectrolitos especialmente a alta concentración de sal y en rangos amplios de pH y aplicar esa comprensión a la simulación molecular de procesos de separación sólido-líquido como coagulación, floculación, espesamiento, sedimentación, flotación, entre otros. El conocimiento alcanzado en esta tesis sobre el comportamiento interfacial de sílica-agua y alúmina-agua puede ser muy útil para entender el comportamiento interfacial de otros minerales más complejos como la caolinita que actualmente amenaza la factibilidad de operaciones mineras, la caolinita es una arcilla cuyo ambiente cristalino lo componen sílice y alúmina. Los resultados de esta tesis también se pueden usar con ventaja para estudiar el comportamiento interfacial de espodumeno mineral rico en litio, cuyo ambiente cristalino lo componen sílice, alúmina y dióxido de litio, cuya explotación industrial recién comienza a evaluarse.