

ESTUDIO TEÓRICO DE UN NANOFUIDO BASADO EN NANOTUBOS DE CARBONO.

“la técnica de simulación de Dinámica Molecular que hemos utilizado, constituye una poderosa herramienta para el estudio de sistemas complejos de la materia.”

Sánchez-Marquez. J, Carrillo-Berdugo. I, Zorrilla-Cuenca. D.

Equipo de investigación Simulación, Caracterización y Evolución de Materiales, Instituto IMEYMAT, Universidad de Cádiz.

Investigaciones recientes sobre los procesos de transferencia de calor han puesto de manifiesto que la dispersión de estructuras nanométricas en fluidos convencionales mejoran extraordinariamente sus propiedades para el transporte de calor. Los nanofluidos, que es el nombre que reciben estas suspensiones coloidales, constituyen una nueva generación de fluidos de transferencia de calor con aplicación en diversas áreas, aunque destacan especialmente por su aplicación en sistemas de producción energética en centrales solares de concentración.

En este proyecto se ha realizado un estudio teórico de nanofluidos basados en nanotubos de carbono y con este fin se ha desarrollado un modelo para la simulación de la estructura microscópica y del comportamiento de los nanofluidos, que ha contribuido a una mejor comprensión del origen de sus propiedades desde el punto de vista de las interacciones entre sus componentes.

La finalidad última de este proyecto ha sido crear un modelo realista y práctico de nanofluidos empleados en el transporte de energía térmica, que permita dar respaldo teórico a los trabajos experimentales realizados por otros investigadores del Instituto. La aportación principal es el diseño y puesta a punto de un modelo teórico predictivo-interpretativo que permite la simulación de sistemas nanoestructurados.

ra-fluido base formado por nanopartículas de carbono con diferentes estructuras (empleando cantidades masivas de átomos) que permite predecir las propiedades térmicas del nanofluido cambiando las condiciones de simulación (P, V, T, ...), así como su estructura microscópica. Este estudio teórico de sistemas nanofluidos estaría incardinado dentro de las líneas del IMEYMAT, donde el estudio de nanofluidos es una de sus líneas prioritarias, con proyectos vigentes.

Desde el punto de vista teórico, la técnica de simulación de Dinámica Molecular, que hemos utilizado, constituye una poderosa herramienta para el estudio de sistemas complejos de la materia. La evolución temporal del sistema de partículas, que interactúan mediante ciertos potenciales de interacción, se calcula por integración numérica de las ecuaciones de movimiento clásicas. De esta manera, la Dinámica Molecular puede ser empleada para el cálculo de propiedades termofísicas y especialmente de transporte de nanofluidos. Recientes trabajos con sistemas nanofluidicos de Pt-agua, Cu-Ar, Cu-agua han calculado su conductividad térmica a pesar de ser uno de los coeficientes de transporte de más difícil cálculo. Por otra parte, se pueden deducir otras características del sistema, como por ejemplo, la ralentización del movimiento Browniano de las nanopartículas a través del nanofluido. Dado que, en general, la dinámica molecular se puede considerar un puente de unión

entre el trabajo experimental y el teórico resulta apropiado su empleo en este proyecto, pudiéndose complementar los datos experimentales con los resultados de los modelos teóricos.

La primera tarea que se realizó en el proyecto fue la obtención de los potenciales de interacción atómica. Para esto se realizó un estudio mecano-cuántico que permitió obtener los parámetros de los potenciales. La metodología de cálculo que se utilizó para esta tarea fue “Density Functional Theory” y el software utilizado para realizar los cálculos fue el programa comercial Gaussian09.

La segunda tarea del proyecto consistió en la optimización de parámetros de los potenciales de interacción atómica. Esto se realizó para alcanzar un nivel de error aceptable en las simulaciones. Se emplearon datos experimentales representativos de los sistemas a estudiar para optimizar los parámetros de los potenciales que previamente se obtuvieron del estudio mecano-cuántico. El software empleado para realizar las simulaciones de dinámica molecular fue el código LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Este potente software (<http://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>) es un código de dinámica molecular clásica que permite modelar conjuntos de partículas en estado líquido, sólido o gaseoso. También puede simular sistemas atómicos, poliméricos, biológicos, metálicos o granulares, usando una gran variedad de campos de fuerza y condiciones de contorno. LAMMPS permite modelar sistemas que pueden variar ampliamente en el número de partículas (desde unas pocas hasta millones o miles de millones).

La tercera tarea que se realizó fue la validación del modelo, es decir se realizaron simulaciones controladas para reproducir valores experimentales bien conocidos para poder establecer el grado de error cometido en las simulaciones.

Se emplearon simulaciones de prueba tan parecidas como se pudo a los sistemas que se pretendían estudiar posteriormente. Para esto se realizaron baterías de simulaciones de prueba relevantes para el estudio y se comprobó que el error cometido en las simulaciones era lo suficientemente bajo como para poder sacar conclusiones acertadas en sistemas similares a los de prueba.

La última tarea fue la obtención de datos, resultados y conclusiones para lo que se realizaron simulaciones de gran precisión controlando las condiciones de presión, volumen y temperatura. A los datos obtenidos de las simulaciones se les realizó un tratamiento matemático estadístico del que se obtuvieron las propiedades simuladas de los sistemas bajo estudio.

El objetivo del proyecto ha sido alcanzado en su totalidad puesto que el modelo que se pretendía desarrollar ha sido construido y probado. En lo que respecta a su aportación a beneficiar a otras líneas prioritarias del Instituto, es evidente que el desarrollo de una metodología de cálculo capaz de dar soporte teórico (desde el campo de la mecánica estadística) al resto de las investigaciones del Instituto, con perfiles mucho más experimentales, tiene un potencial altísimo. Esto es cierto, siempre y cuando la metodología de cálculo propuesta sea lo suficientemente general como para poderse adaptar a los “sistemas” estudiados por el resto de los grupos del instituto. Obviamente no todos los casos podrán ser tratados, pero pensamos que una gran parte sí, ya que la metodología propuesta puede generalizarse considerablemente empleando campos de fuerza estandarizados (por ejemplo OPLS, CHARMM, AMBER, DREIDING, ...) y mejorando posteriormente los parámetros de los potenciales con datos experimentales representativos del sistema bajo estudio como se ha realizado en este proyecto, y como se ha podido comprobar esta combinación conduce a resultados satisfactorios.

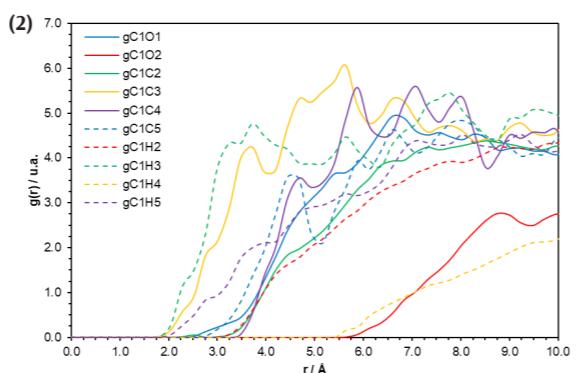
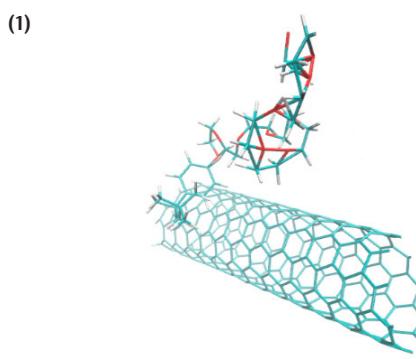
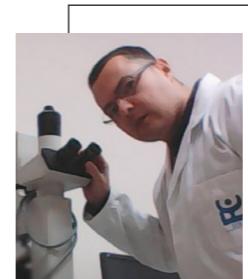


Figura 1. Imagen de las interacciones entre el surfactante y el nanomaterial. **Figura 2.** Las funciones de distribución radial indican que es mucho más probable encontrar al grupo 4-(1,1,3,3-tetrametilbutil)fenilo del Triton X-100 ($gC1C3$, $gC1C4$, $gC1C5$, $gC1H3$ y $gC1H5$) orientado hacia la pared de carbono, mientras que su cadena oxicarbonada ($gC1O1$, $gC1O2$, $gC1C2$, $gC1H2$ y $gC1H4$) permanece en el fluido base, en consonancia con la imagen 3D. Esta disposición es coherente con un mecanismo de encapsulación y adsorción hemicelar del nanotubo con el surfactante, lo que favorece su interacción con el fluido base.



Las principales líneas a las que el Dr. Jesús Sánchez Márquez se dedica actualmente se centran en la simulación por dinámica molecular de sistemas de grandes dimensiones (por ejemplo, nanofluidos), en el desarrollo de nuevos modelos teóricos de reactividad dentro del marco del DFT conceptual, en la definición de nuevos descriptores de reactividad (por ejemplo, nuevos índices de reactividad) y la aplicación de estos nuevos descriptores a sistemas de interés (por ejemplo, moléculas biológicas).