



UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN
DIRECCIÓN DE POSTGRADO
FACULTAD DE INGENIERÍA - PROGRAMA DE DOCTORADO EN
CIENCIAS DE LA INGENIERÍA CON MENCIÓN EN INGENIERÍA QUÍMICA

ATOMISTIC STUDIES OF WATER TRANSPORT IN NANOFLUIDIC CONDUITS

POR

ELTON EDGARDO OYARZUA VARGAS
CONCEPCION - CHILE 2018

Tesis para optar al grado de Doctor en Ciencias de la Ingeniería
con mención en Ingeniería Química

Tutor: Dr. Harvey A. Zambrano
Departamento de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería - Universidad de Concepción

Co-tutor: Dr. Jens H. Walther
Department of Mechanical Engineering
Technical University of Denmark

Resumen

El comportamiento dinámico y estático de fluidos en contacto con un substrato en la nanoescala ha sido sujeto de un intensivo estudio durante las últimas dos décadas debido a su relevancia en medicina, biología e ingeniería. Del mismo modo, los avances en técnicas de fabricación están haciendo posible el diseño y desarrollo de dispositivos nanofluídicos con capacidades sin precedentes, basados en las extraordinarias propiedades dinámicas, térmicas y electrocinéticas de los fluidos nanoconfinados. En consecuencia, con el fin de fabricar estos sistemas altamente precisos, y diseñar sus partes funcionales, es que el entendimiento fundamental del transporte de fluidos al interior de nanoestructuras es necesario.

En esta tesis se utilizaron simulaciones de dinámica molecular para investigar el transporte de fluidos en nanoconductos, analizando diferentes mecanismos de transporte para impulsar flujo de agua. Se estudió el fenómeno de capilaridad en la nanoescala como el mecanismo inherente en el llenado de canales hidrofílicos en etapas tempranas. La descripción atomística del llenado capilar confirma que la entrada espontánea sigue un régimen puramente inercial descrito por una velocidad constante durante sus primeros instantes de llenado. Posteriormente, el llenado capilar adquiere un flujo desarrollado en el cual la fuerza capilar es balanceada por las contribuciones de disipación viscosa y el momento inercial.

En esta tesis también se realizó un análisis fundamental del movimiento termoforético de gotas de agua confinadas en nanotubos de carbono (CNTs), con especial énfasis en la relación entre la velocidad de avance de la gota de agua y las contribuciones de la fuerza termoforética y la fuerza de fricción en la pared. Los resultados obtenidos indican que la fuerza termoforética no depende de la velocidad de avance de la gota, mientras que la fuerza de fricción incrementa linealmente con esta velocidad. En esta investigación se encontró además que la magnitud de la fuerza termoforética es determinada por el gradiente de temperatura impuesto y el largo particular de la gota. Estos resultados entregan un mayor entendimiento sobre el fenómeno de termofóresis en gotas de agua confinadas en CNTs, con implicaciones en el desarrollo de nanosenores, membranas de filtración y procesos de separación. Finalmente, en esta tesis se estudió la capacidad de los CNTs para conducir un movimiento continuo de agua mediante la aplicación directa de un gradiente de temperatura. Para ello se ha propuesto un nanomotor basado en el concepto de motor térmico Browniano el cual aprovecha las fluctuaciones térmicas inherentes en esta escala molecular. El dispositivo consiste en un CNT de capa simple, completamente lleno de agua, con puntos fijos específicos a lo largo del nanotubo de carbono más un gradiente de temperatura impuesto axialmente. En este dispositivo, el mecanismo que impulsa el fluido son las oscilaciones térmicas asimétricas inducidas a lo largo del CNT, las cuales rectifican el movimiento del fluido en un movimiento constante de tipo “latigo”.