

DINÁMICA MOLECULAR PARA EL ESTUDIO DE MEMBRANAS POLIMÉRICAS

Rodolfo Cruz Silva¹

¹Centro de Investigación en Química Aplicada, Procesos de Transformación de Plásticos, Mexico.

El uso de membranas poliméricas va en aumento debido a la creciente necesidad de agua pura. La dinámica molecular es una herramienta que permite la simulación computacional de las membranas poliméricas, así como el diseño y estudio de estas membranas con mayor profundidad. Por una parte, el estudio de la difusión del agua y sales a través de las membranas, permite entender la permeación y el rechazo. Por otra parte, el estudio de la adhesión de contaminantes en la superficie de las membranas permite predecir su ensuciamiento (fouling) y su vida útil. En años recientes el incremento en capacidad computacional ha permitido que el uso de dinámica molecular como herramienta de simulación de polímeros se haya popularizado. En esta plática, mostraremos algunos casos de estudio basados en membranas de poliamida, donde estudiamos la adhesión de proteínas, como la lisozima y la albúmina de suero bovino; sales como el carbonato de calcio; y materia orgánica como el ácido húmico y el alginato. Presentaremos también un mecanismo para construir y parametrizar nuevos polímeros entrecruzados, que tradicionalmente son difíciles de simular. Finalmente, se discutirán algunas técnicas de simulación, las necesidades de hardware, así como el software disponible que permite a cabo realizar las simulaciones.

Keywords: química computacional, fouling, membranas poliméricas

Presenting author's email: rodolfo.cruz@ciqa.edu.mx