

ESTUDIO TEÓRICO DE LA ESTRUCTURA Y LA DINÁMICA DE UN NANOFLUIDO CON PARTÍCULAS DE CuO.

Torres-Ávila, E, Carrillo-Berdugo, I, Zorrilla-Cuenca, D.

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

Una gran parte de la energía que se produce actualmente se emplea a procesos de transferencia de calor cuya eficiencia se ha visto limitada en los últimos años. El desarrollo e investigación en el ámbito de la nanotecnología ofrece una posible solución a esta problemática mediante el uso de un nuevo tipo de fluidos para transferencia de calor: los nanofluidos. Éstos se definen como suspensiones coloidales de materiales nanoestructurados con unas propiedades térmicas que los hacen más efectivos que otros fluidos empleados convencionalmente como el agua, el etilenglicol o los aceites. Este tipo de fluidos encuentra un nicho de aplicación en la industria termosolar, en la que habitualmente se emplea un aceite térmico que destaca por ser no corrosivo, resistente a la degradación térmica y útil en estado líquido en un rango de temperaturas de operación de hasta 400°C, aunque presenta una muy baja conductividad térmica, lo que podría mejorarse con la adición de una mínima cantidad de nanopartículas. La aplicación directa de los nanofluidos podría suponer un impulso para mejorar la eficiencia de la conversión solar-térmica en las plantas de energía solar de concentración, de las que España es líder global en capacidad de producción energética.

Desde hace algo más de veinte años se pueden encontrar numerosos estudios sobre nanofluidos a nivel experimental, pero son pocos aquellos que, en los fundamentos de la Química teórica, racionalicen el extraordinario cambio

en las propiedades termofísicas del fluido al adicionar una ínfima cantidad de sólido nanoparticulado. Es por ello que en este proyecto se ha realizado un estudio, en el nivel teórico de la Dinámica Molecular, de un nanofluido constituido por nanopartículas de óxido de cobre (II) dispersas en el aceite térmico comercial Dowtherm A (mezcla eutéctica de óxido de difenilo y bifenilo en proporciones 73,5% y 37,5%, respectivamente), típicamente empleado en la industria de energía solar de concentración. Este estudio ha aportado información microscópica acerca de la estructura molecular del sistema, así como resultados sobre la influencia de las nanopartículas en el comportamiento dinámico del sistema. La correcta modelización del sistema permite su uso como herramienta heurística y predictiva para el completo desarrollo de los nanofluidos en el laboratorio.

El primer paso para este estudio es la construcción de un modelo del sistema y la parametrización del campo de fuerza que mejor define las interacciones del conjunto. El modelo de la nanopartícula, con un diámetro de 1.6 nm, está constituido por 197 átomos y se diferencian las interacciones entre los átomos del bulk y la superficie. El modelo de fluido base se construye como un array tridimensional de moléculas de bifenilo y óxido de difenilo, con una geometría intramolecular de mínima energía; las interacciones intermoleculares fluido-fluido y fluido-nanopartículas vienen descritas por una energética de tipo Lennard-Jones.

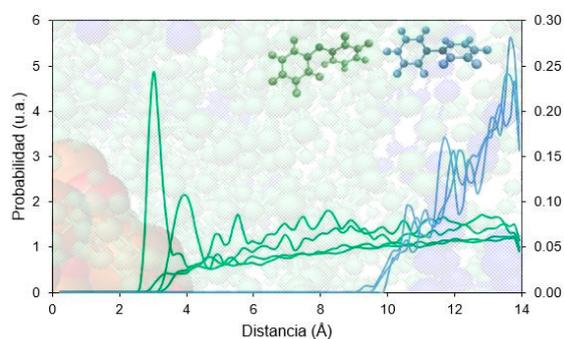


Figura 1. Funciones de distribución radial de los átomos que constituyen las moléculas de óxido de difenilo (en verde) y las de bifenilo (en azul), respecto de los átomos de cobre en la superficie de la nanopartícula.

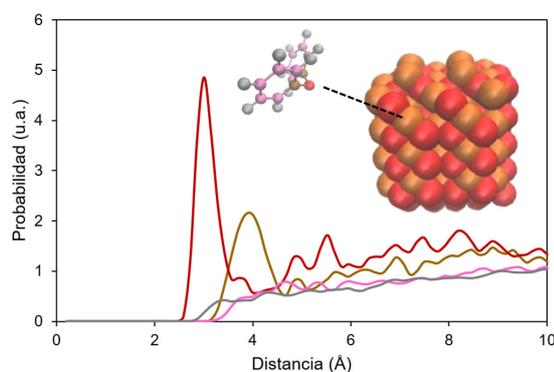


Figura 2. Función de distribución radial de los átomos de la molécula de óxido de difenilo, respecto de los átomos de cobre en la superficie de la nanopartícula. El primer pico indica que la interacción con la nanopartícula tiene lugar, preferentemente, con el átomo de oxígeno, a una distancia de equilibrio de 3.01 Å.

“la aplicación directa de los nanofluidos podría suponer un impulso para mejorar la eficiencia de la conversión solar-térmica en las plantas de energía solar”

La parametrización anterior será la que rijan los cálculos basados de Dinámica Molecular a desarrollar con el software LAMMPS (del inglés, Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Con el objeto de conseguir que el modelo teórico represente fielmente el sistema experimental, se han ejecutado baterías de simulaciones sobre el fluido base y se han comparado algunas de las propiedades computadas con las tabuladas para afinar los parámetros y así ‘calibrar’ el modelo. Una vez se considera que el modelo es válido, se realizan simulaciones del nanofluido para distintas condiciones de presión y temperatura y en las que se calculan los valores de densidad, calor específico isobárico, viscosidad dinámica y conductividad térmica. Además, se estudian también las funciones de distribución radial para reconocer cuál es la disposición más probable de las moléculas del fluido base en torno a la nanopartícula. Los datos obtenidos son tratados y analizados mediante el software apropiado.

Las funciones de distribución radial muestran que la interacción entre las moléculas de óxido de difenilo y la superficie de la partícula de óxido de cobre es preferente a la interacción de esta última con las moléculas de bifenilo (ver Figura 1). Además, se hace evidente que el acercamiento tiene lugar por el oxígeno frente a cualquiera de los otros átomos (ver Figura 2). Analizando los resultados de conductividad térmica, propiedad clave en la transferencia de calor, se concluye que el flujo de calor es notablemente superior para el sistema que contiene la nanopartícula (ver Figura 3), debido probablemente a que la propagación del calor por conducción es más eficaz al aumentar el recorrido libre medio de los fonones, que es mayor para sólidos que para líquidos.

A todos los efectos, podemos considerar que el proyecto ha cumplido con sus objetivos, ya que se ha conseguido estructurar un modelo teórico de un fluido caloportador

convencionalmente usado en la industria termosolar, introducir sobre este el material nanoparticulado y racionalizar los cambios inducidos, a nivel molecular, en su estructura interna y comportamiento. Este estudio contribuye en favor de una de las líneas de investigación del IMEYMAT para el desarrollo de nanofluidos, la cual ya ofrece numerosos estudios a nivel experimental. Las simulaciones teóricas complementan estos trabajos, estimando a priori si un material podría ser adecuado para esta aplicación o evaluar las propiedades en condiciones de alta temperatura que no son experimentalmente factibles con el equipamiento disponible.

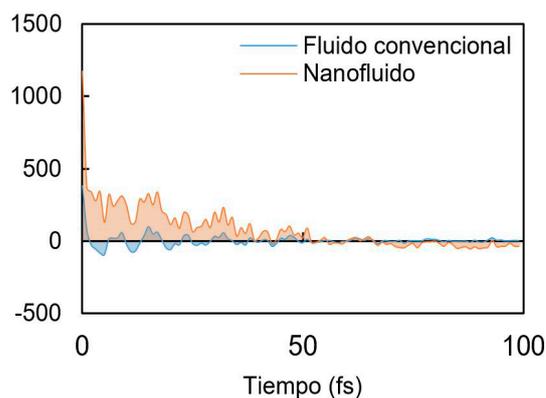


Figura 3. Función de autocorrelación del flujo de calor (FAFC), para el fluido base (en azul) y el nanofluido (en naranja). La integral de esta función es directamente proporcional a la conductividad térmica del fluido. Se observa que la pérdida de correlación es más lenta en el caso del fluido que contiene la nanopartícula, lo que bajo integración supone una conductividad térmica mayor.



El Dr. David Zorrilla es Licenciado en Física Teórica por la Universidad Autónoma de Madrid, donde también cursó un Máster en Simulación Molecular. Se doctoró en Ciencias Químicas (Química Cuántica y Computacional) en la Universidad de Cádiz, donde es Profesor Titular de Universidad en el Depto. de Química Física desde 2017. Actualmente trabaja en el desarrollo de nuevas funciones de base para la simulación de efectos de confinamiento y en la simulación de nanofluidos aplicados a la industria termosolar.