

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA



INSTITUTO DE FÍSICA
“Luis Rivera Terrazas”



SEMINARIO
“DR. JESUS REYES CORONA”

“Modelado molecular de materiales poliméricos semi-cristalinos”

Dra. Susana Figueroa Gerstenmaier
División de Ciencias e Ingenierías, Campus León
Universidad de Guanajuato León, Guanajuato, México.

En esta charla se discutirá la caracterización de dos fases polimorfas cristalinas (d y e) de poliestireno sindiotáctico utilizando modelado molecular. Estos dos materiales polimorfos son materiales nanoporosos, característica que les permite adsorber moléculas de bajo peso molecular en sus cavidades (d) o en sus canales (e). Utilizando simulación molecular Monte Carlo en el colectivo Gran Canónico, se calcularon isothermas de adsorción de hidrógeno, explorando su potencial como material para almacenar dicho gas. Adicionalmente, se corrieron simulaciones de Dinámica Molecular para determinar los coeficientes de auto-difusión de diferentes gases ligeros. Estos últimos resultados se combinaron con las mediciones obtenidas mediante un método geométrico para caracterizar los nanocanales de la fase e, obteniendo con ello un estimado de la forma y tamaño de los canales.

Auditorio-IFUAP

Viernes 29 de Junio de 2012

13:00 Hrs.