

FICHA PARA LA SOLICITUD DE LA BECA DOCTORAL 2016

ORGANIGRAMA División de Negocio Área de Negocio	TECNALIA RESEARCH & INNOVATION CONSTRUCCIÓN SOSTENIBLE Materiales Innovadores y Sostenibles
Ubicación de la beca Provincia/Edificio	BIZKAIA, Parque Tecnológico de Bizkaia, Edificio 700-Derio
Tutor	Jorge Sánchez Dolado

DESCRIPCION DE LA BECA

Título: Diseño de Cementos y Puzolanas Ultrareactivos Mediante Simulación Multiescalar

Descripción corta de la Beca:

Uno de los objetivos más perseguidos por las industrias cementera es incrementar la velocidad de hidratación de cementos y puzolanas. Esto permitiría reducir tiempos y costes en la construcción, reducir el uso de acelerantes químicos, reducir el uso de recursos naturales empleando puzolanas como material suplementario, y recurrir a cementos belíticos que reducen las emisiones de CO₂. A día de hoy, y pese al gran número de estudios empíricos, estos objetivos no se han logrado, y un mayor conocimiento de los procesos fundamentales que gobiernan la hidratación de estos materiales es fundamental para avanzar.

En este proyecto se pretende combinar simulación a escala molecular con métodos Monte Carlo Cinético para obtener el conocimiento necesario que permita dar un paso adelante en el **diseño de cementos y puzolanas ultrareactivos**. Por un lado, la simulación molecular aporta información muy detallada sobre los procesos que tienen lugar a escala atómica y las barreras de energía asociadas a cada proceso. Por otro lado, las simulaciones mediante Monte Carlo Cinético permiten salvar la limitación temporal de las simulaciones moleculares (nanosegundos) y estudiar procesos químicos en escalas macroscópicas (minutos).

Como resultado del proyecto se desentrañará el mecanismo de hidratación de cemento y puzolanas desde la escala molecular hasta la microscópica, desde nanosegundos a minutos, sin asunciones "a priori" ni datos empíricos. Esto permitirá diseñar rutas de síntesis y aditivos como *nanoseeds* que incrementen la velocidad de hidratación de los materiales.

Descripción de la beca:

- Línea de investigación

El proyecto constaría de tres fases bien diferenciadas, enfocadas a estudiar la hidratación de los materiales de interés, es decir, las fases mayoritarias del cemento (alita y belita) y las puzolanas (aluminosilicatos). La metodología no obstante es similar independientemente del material, ya que la se parte de simulaciones atomísticas que no necesitan ningún input específico del material, solo conocimiento de las interacciones atómicas. Las tres fases pueden resumirse en:

a) Desarrollo de metodología: Uno de los grandes retos en simulación molecular es trasladar el conocimiento adquirido desde escala nanométrica a la macroescala. Los métodos de Monte Carlo Cinético (KMC) pueden salvar este vacío, empleando información de procesos interatómicos para simular el comportamiento de los materiales durante minutos. En la primera fase se desarrollará un código KMC para estudiar los fenómenos relevantes durante la disolución de un material: transporte y desorción de unidades del sólido.

b) Escala molecular: En esta parte del subproyecto los materiales se investigaran mediante métodos de simulación atomísticos ab-initio y dinámica molecular. Se determinarán las barreras de energía asociadas a los procesos de disolución de los materiales, las cuales se emplearán como input en nuestro código KMC.

c) Escala microscópica: con la información obtenida a escala molecular y el código KMC desarrollado, se estudiarán los factores que afectan a la hidratación de fases de cemento y puzolanas. Entre otros factores podremos investigar el efecto del tamaño de partícula, relaciones aspecto/tamaño, forma de los cristales, impurezas, efecto de acelerantes, etc.

- Objetivos

El objetivo final es determinar el mecanismo de hidratación de cemento y puzolanas desde la escala molecular hasta la microscópica y desde nanosegundos a minutos, y emplear la información obtenida para proponer nuevos aceleradores de la hidratación (*nanoseeds*, aceleradores químicos) o métodos de síntesis que modifiquen las fases del cemento para aumentar su reactividad.

- Proyectos en los que se enmarcará la actividad

Proyecto GEI Green Concrete Design , EMAITEK (nanoseeds) y ETORTEK

- Universidad de realización del Doctorado, acuerdo director

Hay un acuerdo con el profesor Iñigo López Arbeloa del Departamento Química Física de la Facultad de Ciencia y Tecnología de la Universidad del País Vasco UPV/EHU para llevar a cabo este Doctorado.

Requisitos:

Para ello se busca un perfil que cumpla con los siguientes requisitos:

- **Titulación y Especialidad:**
Licenciatura/Diplomatura en Física, especialidad en computación científica
- **Idiomas: (nivel de dominio)**
Inglés (medio/alto)
- **Informática (especificar programas y nivel de dominio)**
Programación en lenguajes FORTRAN y C++, Matlab, UNIX
- **Se valorará:**
Nota expediente académico, Posesión de un Master relacionado con el proyecto.