

2016an DOKTORETZA-BEKA ESKATZEKO FITXA

ERAKUNDEA Negozio-dibisioa Negozio-arloa	TECNALIA RESEARCH & INNOVATION ERAIKUNTZA JASANGARRIA Material Berritzaileak eta Jasangarriak
Beka-egonaldia non egingo den Probintzia/Eraikina	BIZKAIA, Bizkaiko Teknologia Parkea, 700 eraikina-Derio
Tutorea	Jorge Sánchez Dolado

BEKAREN DESKRIBAPENA

Izenburua: Zementu eta puzolarri ultrarreaktiboak eskala anitzeko simulazio bidez diseinatzea

Bekaren deskribapen laburra:

Zementu-industriaren helburu handienetako bat zementuaren eta puzolarrien hidratazio-abiadura handitzea da. Helburu hori lortuz gero, eraikuntza-denbora eta -kostuak murriztu daitezke, azeleratzaile kimiko gutxiago erabil daitezke, puzolarriak material osagarri gisa erabiliz baliabide natural gutxiago gastatu daitezke, eta zementu belitikoak erabil daitezke CO₂-emisioko murrizteko. Gaur egun, ikerketa enpiriko asko egin arren, helburu hori erdietsi gabe dago. Aurrera egin ahal izateko, ezinbestekoa da aipatutako materialen hidratazioa baldintzatzen duten oinarritzko prozesuak hobeto ulertzea.

Proiektu honetan, eskala molekularreko simulazioa eta Montecarlo Zinetikoaren metodoa (KMC) konbinatzen dira, **zementu eta puzolarri ultrarreaktiboan diseinuan** aurrera egin ahal izateko. Batetik, simulazio molekularrak informazio xehea ematen du eskala atomikoan gertatzen diren prozesuei eta bakoitzari lotutako energia-hesiei buruz. Bestetik, Montecarlo Zinetikoaren ereduaren bidezko simulazioei esker, simulazio molekularren denborazko muga (nanosegundoak) saihestu daiteke, eta prozesu kimikoak eskala makroskopikoan (minutuak) ikertu.

Proiektuaren emaitzak zementuaren eta puzolarrien hidratazio-mekanismoa azalduko du, hasi eskala molekularretik eta eskala mikroskopikoraino, hasi nanosegundoetatik eta minutuetaraino, datu enpirikorik gabe eta "a priori" ezer suposatu gabe. Horri esker, materialen hidratazio-abiadura handitzen duten sintesi-bidezidorrak eta gehigarriak (*nanoseed*) diseinatu ahal izango dira.

Bekaren deskribapena:

- Ikerketa-lerroa

Proiektuak hiru fase oso desberdinak ditu, gure intereseko materialen hidratazioa ikertzera bideratuak, hau da, zementuaren fase nagusiak (alita eta belita) ikertzera eta puzolarriak (aluminosilikatoak) ikertzera bideratuak. Metodologia antzekoa da beti, materiala desberdina izan arren; izan ere, material-sarrera berariazkorik behar ez duten simulazio atomistikoak egiten dira, eta nahikoa da interakzio atomikoak ezagutzearekin. Hona hemen hiru faseen laburpena:

a) Metodologiaren garapena: Simulazio molekularren erronka handienetako bat da lortutako ezagutza eskala nanometrikotik makroeskalara pasatzea. Montecarlo Zinetikoaren ereduak (KMC) baliagarriak izan daitezke horretarako, atomoen arteko prozesuen informazioa erabiliz materialen jokabidea minutu batzuek simulatzeko. Lehenengo fasean, Montecarlo kode bat garatuko dugu material baten disoluzioan gertatzen diren fenomeno nabarmenenak ikertzeko: solido-unitateen garraioa eta desortzioa.

b) Eskala molekularra: Azpiproiektuaren atal honetan, ab-initioko simulazio-metodo atomistikoak eta dinamika molekularrekoak erabiliko dira materialak ikertzeko. Materialen disoluzio-prozesuei lotutako energia-hesiak zehaztu, eta sarrera gisa erabiliko ditugu gure KMC kodean.

d) Eskala mikroskopikoa: Eskala molekularrean lortutako informazioarekin eta garatutako KMC kodearekin, zementuaren eta puzolarrien faseen hidratazioari eragiten dioten faktoreak aztertuko ditugu. Beste faktore batzuekin batera, hauek ikertu ahal izango ditugu: partikula-tamainaren eragina, itxuraren eta tamainaren arteko erlazioa, kristalen itxura, ez-purutasunak, azeleratzaileen eragina, etab.

- Helburuak

Zementuaren eta puzolarrien hidratazioaren mekanismoa zehaztea da azken helburua, hasi eskala molekularretik eta mikroskopikoraino, eta nanosegundoetatik eta minutuetaraino. Horretaz gainera, lortutako informazioa erabiliz, zementuaren erreaktibotasuna handitzeko, hidratazioaren azeleratzaile berriak (*nanoseed*, azeleratzaile kimikoak) edo zementuaren faseak aldatuko dituzten sintesi-metodoak proposatuko dira.

- Jarduera zer proiektutan sartuko den

GEI Green Concrete Design, EMAITEK (*nanoseed*) eta ETORTEK.

- Doktoretza egingo den unibertsitatea eta irakaslearekiko akordioa

Doktoretza hau egiteko, akordio bat dugu Euskal Herriko Unibertsitateko Zientzia eta Teknologiaren Fakultateko Kimika Fisikoko Departamentuko Iñigo López Arbeloa irakaslearekin.

Eskakizunak:

Horretarako, eskakizun hauek beteko dituen profil bat bilatzen dugu:

- Titulua eta espezialitatea: Fisikako lizentzia/diploma, konputazio zientifikoaren espezialitatean
- Hizkuntzak: Ingelesa (ertaina/altua).
- Informatika FORTRAN eta C++, Matlab, UNIX lengoaietan programatzen jakitea.
- Balioetsiko da: Espediente akademikoko nota. Proiektuarekin erlazionatutako master bat izatea.