

FONDECYT INICIACIÓN 2017

Investigador Responsable: ANDREA MARÍA OYARZÚN ARAVENA

“Computational chemistry for elucidating reaction mechanisms of graphene with relevant oxygen containing molecules”

El proyecto llamado “Computational chemistry for elucidating reaction mechanisms of graphene with relevant oxygen containing molecules” pretende implementar computadores de alto rendimiento (HPC) para desarrollar investigación teórica sobre reacciones de combustión. Este proyecto fue ideado a partir de interrogantes surgidas en el trabajo de tesis de la investigadora principal y busca contestar preguntas fundamentales referentes a dos temas específicos: (a) efectos particulares observados ante la saturación de los bordes de grafeno y (b) el mecanismo de reacción de los NO con los bordes de la molécula de grafeno. La importancia del primer tema va relacionada con el desarrollo de nuevas tecnologías que utilicen grafeno, mientras que el segundo tema es de relevancia para crear nuevas tecnologías de abatimiento del contaminante ambiental NO_x, causante de generar problemas en el sistema respiratorio en las grandes ciudades. Se espera que la información básica generada con este proyecto contribuya al entendimiento de las reacciones involucradas y al desarrollo de nuevas tecnologías limpias.

El proyecto se desarrollará en la Universidad de Magallanes y en colaboración con la empresa Methanex, contribuyendo de esta manera al desarrollo de la investigación en la región.