

Títol	Modificació de membranes 2D de grazins per l'enriquiment de biogas
Title	Tuning 2D Grazynes Membranes for Biogas Upgrading

Director	Dr. Pablo Gamallo i Dr. Francesc Viñes
Departament	Ciència de Materials i Química Física
Universitat	Universitat de Barcelona
Tutor¹	

Curs	2023-24
-------------	----------------

Summary²	
Grazynes, a new type of C-based layered materials, display a series of pores whose size can be tuned and used, <i>e.g.</i> for different gas separation processes (biogas upgrading, direct air capture of CO ₂ , CO ₂ separation in post-combustion mixtures, etc). Here the diffusion across the pore is studied from Density Functional Theory (DFT) calculations on suited periodic models, using the Perdew-Burke-Ernzerhof (<i>PBE</i>) exchange-correlation functional with Grimme's D3 treatment of dispersive forces, gaining and characterizing the diffusion transition states and energy barriers, while analysing the pore size and bond termination, and the dynamics of diffusion through classical molecular dynamics.	
Keywords³	Density Functional Calculations · Grazynes · Molecular Dynamics · Gas separation · CO ₂ · CH ₄ · Diffusion · Terminations

Breu descripció del projecte⁴
<p>Una estratègia econòmica per a la separació de gasos és a través d'un material porós. Recentment, s'han proposat els grazins, al·lòtrops bidimensionals de carboni amb nanopors de grandàries molt diferents, per a realitzar la separació de CO₂ i metà (CH₄) en l'anomenat biogas [Viñes <i>et al. J. CO₂ Util.</i> 71 (2023) 102459]. La família dels grazins, uns grafins amb direccionalitat ortogonal dels àtoms de C <i>sp</i> i <i>sp</i>² [Kamalinahad <i>et al. J. Phys. Chem. C</i> 123 (2019) 27140–27149] també són candidats prometedors Nanotecnologia degut a la seva conductivitat electrònica preferent a través de grups acetilènics disposats en paral·lel [Alcón <i>et al. J. Phys. Chem. Lett.</i> 12 (2021) 11220–11227].</p> <p>Estudis previs computacionals basats en simulacions de primers principis sobre aquests nous al·lòtrops bidimensionals de carboni van assenyalar que, mitjançant la inclusió de defectes, es poden crear nanopors ordenats que permetin el pas del CO₂ i no del CH₄ [Viñes <i>et al. J. CO₂ Util.</i> 71 (2023) 102459]. Però, encara que hi hagin indicis, cal veure si l'estabilitat dels grazins es veu compromesa amb els defectes, i com es poden modificar aquestes estructures per tal d'incrementar la selectivitat en vers un dels components de la mescla gasosa. En aquest treball de fi de màster s'estudiarà la termodinàmica de la difusió a través de membranes bidimensionals de grazins de diferents espècies gasoses, trobant les barreres de difusió dels gasos en funció de les terminacions d'enllaç dins el por (amb H, F, Cl, Br, I, CH₃...). Les mescles gasoses que s'estudiaran correspondran en mescles de enriquiment de biogas (CO₂, CH₄) on la separació del diòxid de carboni és clau per per augmentar el poder calorífic del biometà.</p> <p>Per realitzar aquest estudi computacional, s'utilitzaran models periòdics emprant un paquet de càlcul amb condicions periòdiques —<i>Vienna Ab Initio Simulation Package - VASP</i>—, calculant i caracteritzant les barreres de difusió realitzant càlculs computacionals basats en la teoria del funcional de la densitat (<i>Density Functional Theory – DFT</i>), utilitzant el funcional correlació i intercanvi de Perdew-Burke-Ernzerhof (<i>PBE</i>) i la correcció de Grimme D3 per a tenir en compte l'efecte de les forces dispersives, un nivell de càlcul que s'ha trobat adient per a estudiar la difusió atòmica a través de capes de grafins [Kim <i>et al. Appl. Surf. Sci.</i> 499 (2020) 143927]. S'estudiaran les velocitats de permeabilitat, selectivitat, i diagrames de fase cinètics d'aquests sistemes en condicions d'operació en base a models de càlcul estàtics. Però, la cinètica de la separació de gasos es mirarà també, analitzant efectes dinàmics, mitjançant dinàmiques moleculars en condicions de treball per quantificar la difusió molecular, emprant dinàmiques clàssiques fent servir camps de forces mitjançant el programa LAMMPS. Si el temps ho permet, es planteja fer servir camps de força adquirits mitjançant aprenentatge automàtic emprant dinàmiques moleculars <i>ab initio</i>.</p>

¹Si el director no és un professor de la UB o e la UPC, caldrà assignar un tutor del TFM que designarà la Comissió Coordinadora del Màster.

²Aquest "summary" és el que apareixerà a la futura pàgina web dedicada al TFM. Procureu que sigui concís i entenedor (máx. 10 línies).

³Aquestes "keywords" no només són les que apareixeran al web sinó que ajudaran la Comissió Coordinadora del Màster a assignar el projecte a un àrea concreta.

⁴Procureu ser concisos però proporcioneu prou informació per tal que l'estudiant i la Comissió Coordinadora del Màster es facin una idea prou acurada de en què consistirà el treball. Indiqueu 3-6 publicacions de referència en la descripció del projecte per donar una idea dels fonament, metodologia, objectius, etc.

Competències addicionals⁵ (opcional)

Tasques a desenvolupar ⁶		Cronograma (setmanes)																	
Tasca	Descripció	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16	17	18
T01	Bibliografia (20h)	x	x																
T02	Aprenentatge de VASP i LAMMPS (30h)		x	x	x														
T03	Optimització de Models i Pors (40h)			x	x	x	x												
T04	Barreres de Difusió (50h)				x	x	x	x	x										
T05	Caracterització de Freqüències (30h)							x	x	x									
T06	Dinàmiques Moleculares Clàssiques (80h)								x	x	x	x	x	x	x	x			
T07	Dinàmiques Moleculares <i>Ab Initio</i> (80h)									x	x	x	x	x	x	x	x		
T08	Avaluació de Resultats (70h)												x	x	x	x	x	x	x
T09	Redacció de la Memòria (50h)														x	x	x	x	x
T10																			

Observacions i comentaris

Per a la realització del treball pròpiament dit es preveu una dedicació d'unes quatre hores diàries durant cinc dies a la setmana, amb la opció de modificació de l'horari per poder adaptar-se millor a l'horari acadèmic de l'estudiant.

Signatura (el directors del TFM)

Signatura (el tutor del TFM, si s'escau)

⁴ Enumereu breument qualsevol competència addicional a les competències genèriques enumerades en el Pla Docent del TFM (opcional).

⁵ Feu servir només les línies que calgui. Escolliu-les de manera que donin una idea aproximada de en què consistirà el treball i la seva distribució temporal.