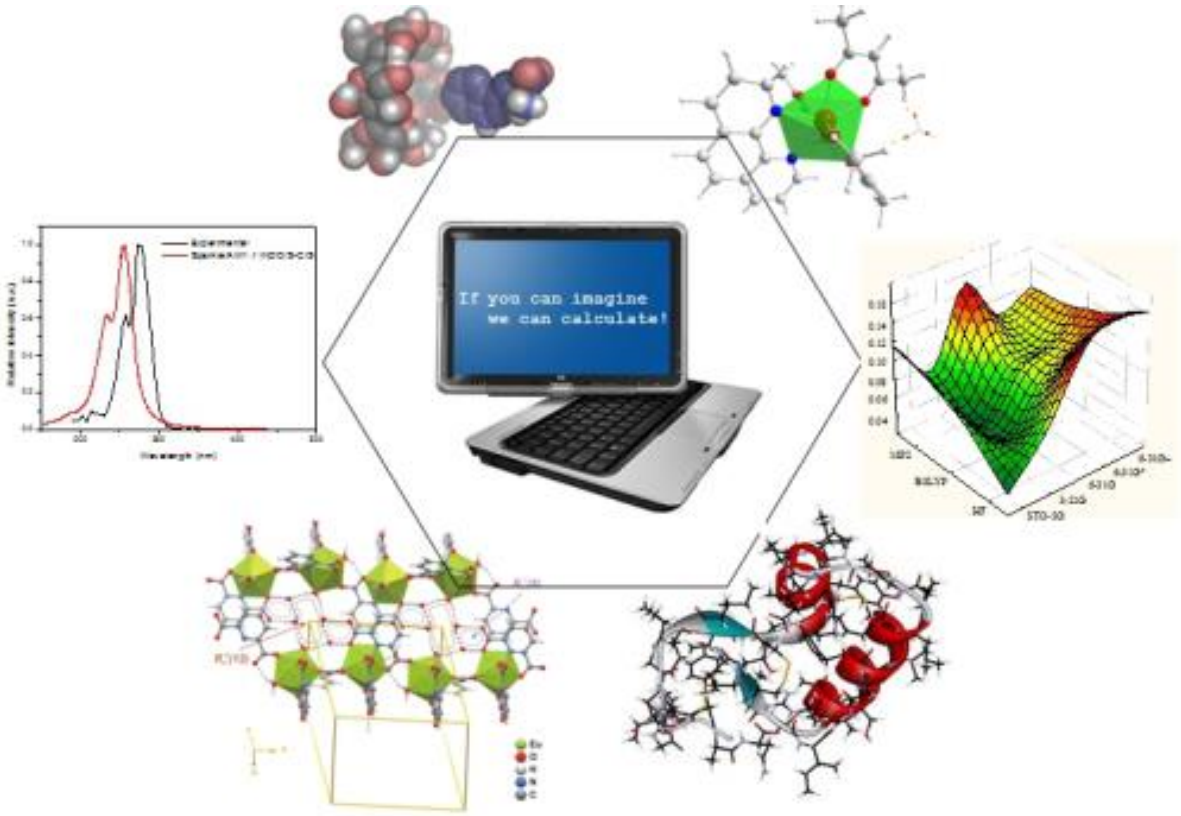
Proposte di Tesi in Chimica Computazionale

Prof. Alfonso Pedone
Prof. M. C. Menziani
Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche

La chimica computazionale si occupa dello sviluppo ed applicazione di modelli matematici, basati sia sulla meccanica classica che quantistica, in grado di simulare sistemi chimici, con lo scopo di calcolarne le grandezze fisiche caratteristiche e prevederne le proprietà chimiche.



Il gruppo di ricerca



Prof. Maria Cristina Menziani

Sito web: https://sites.google.com/site/compmaterchem/home



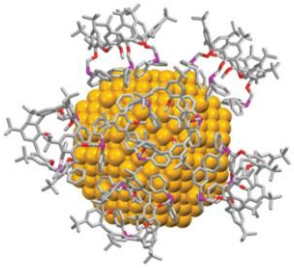
Dr. Francesco Muniz-Miranda

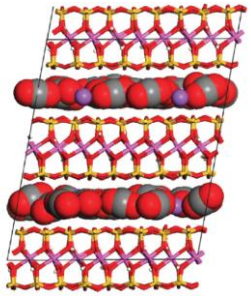


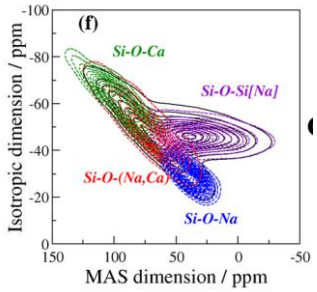
Dr. Davide Presti

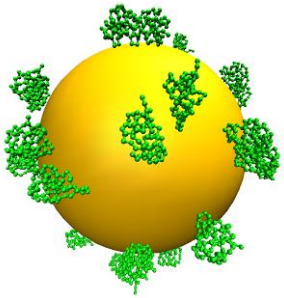


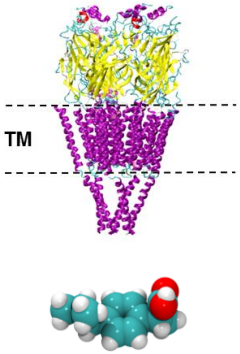
Dr. Francesco Tavanti











Titoli progetto di tesi

Valutazione del potere assorbente di fillosilicati modulari verso la CO_2 attraverso simulazioni di dinamica molecolare.

Studio dell'interazione tra CO_2 supercritica e fillosilicati modulari attraverso simulazioni di dinamica molecolare classica

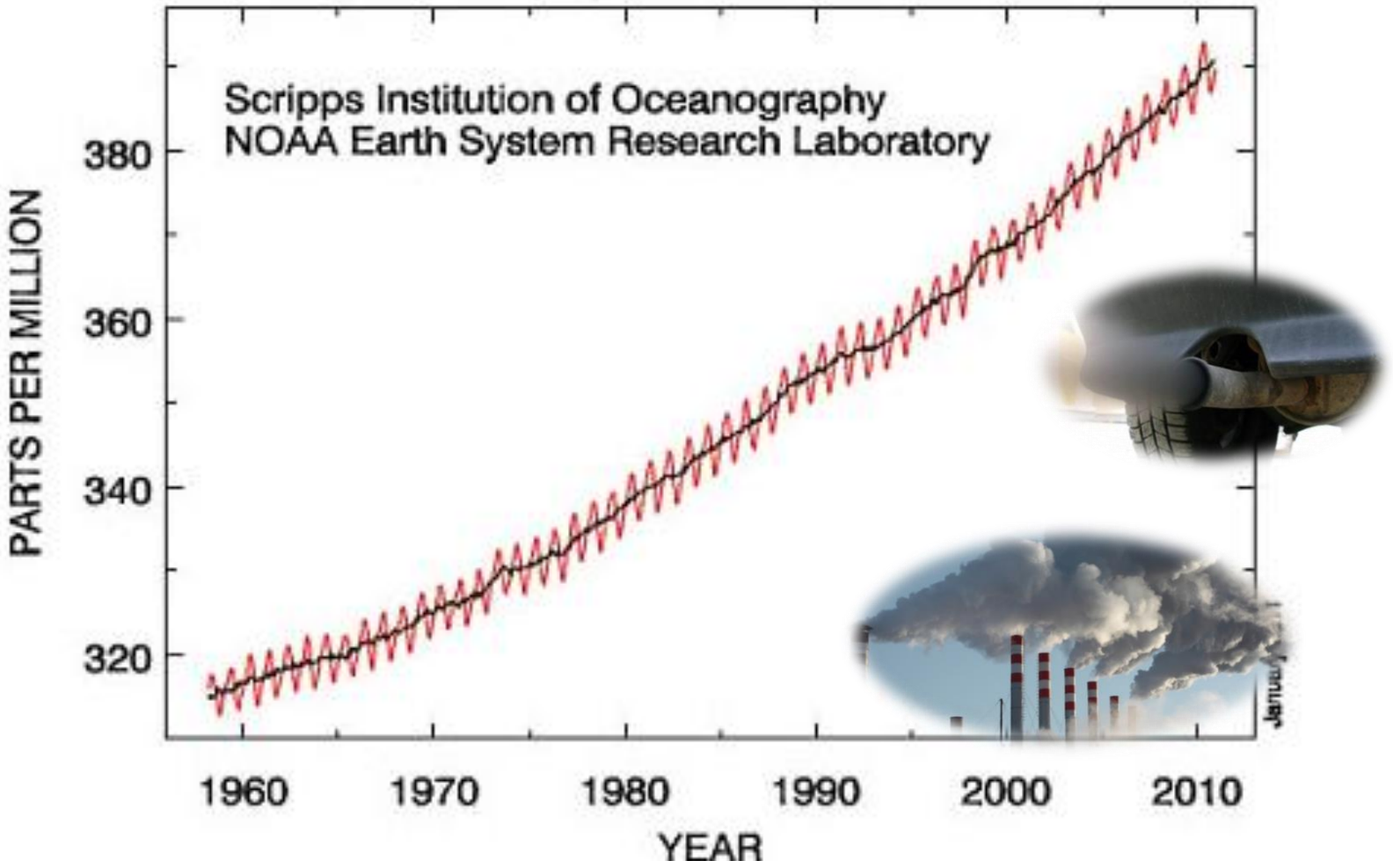
Numero di Posti disponibili: 2

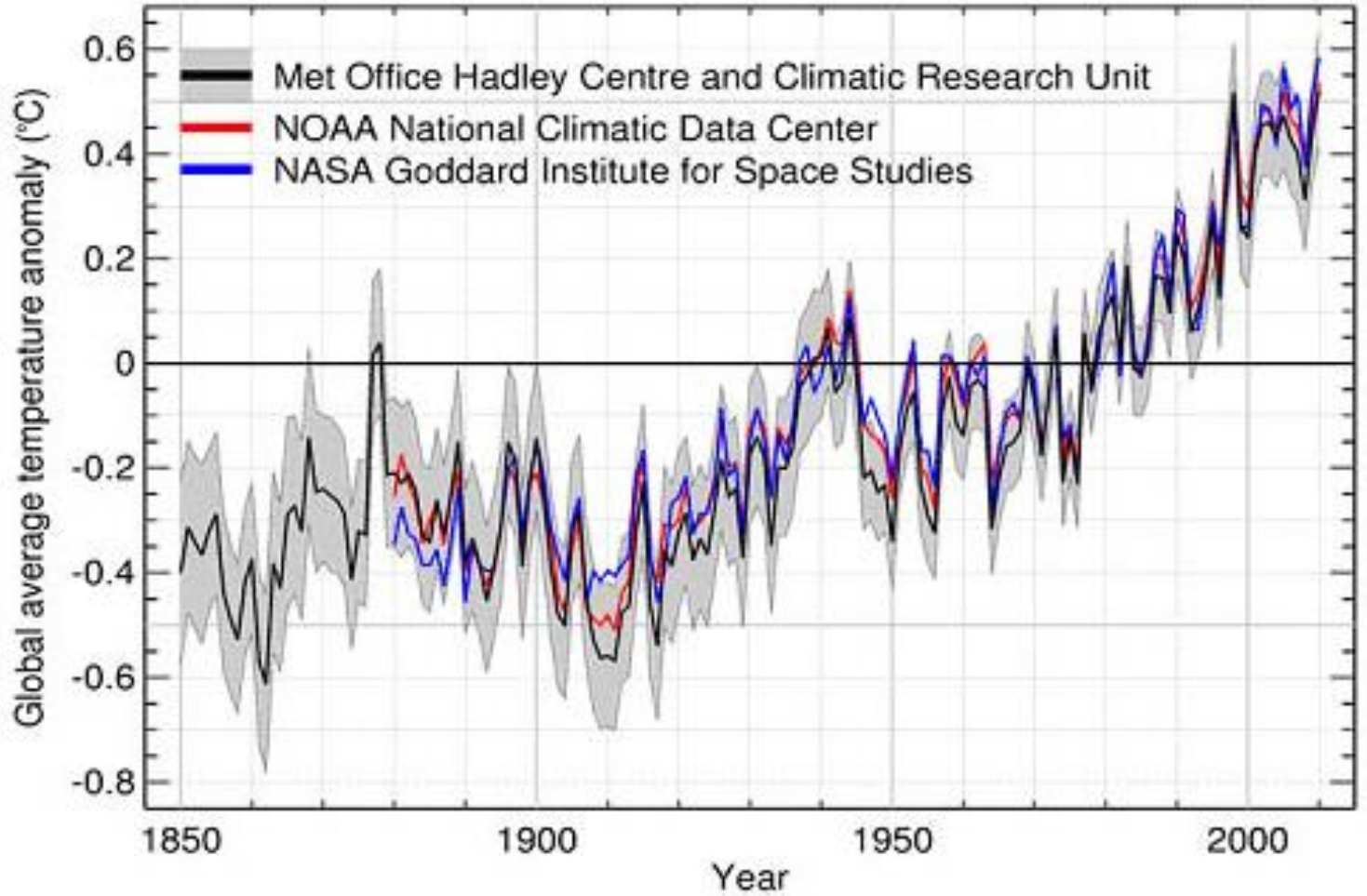
Inizio attività: Marzo/Aprile 2016

Progetto: Ruolo dei fillosilicati modulari per la cattura e lo stoccaggio di CO_2: uno studio sperimentale e computazionale.

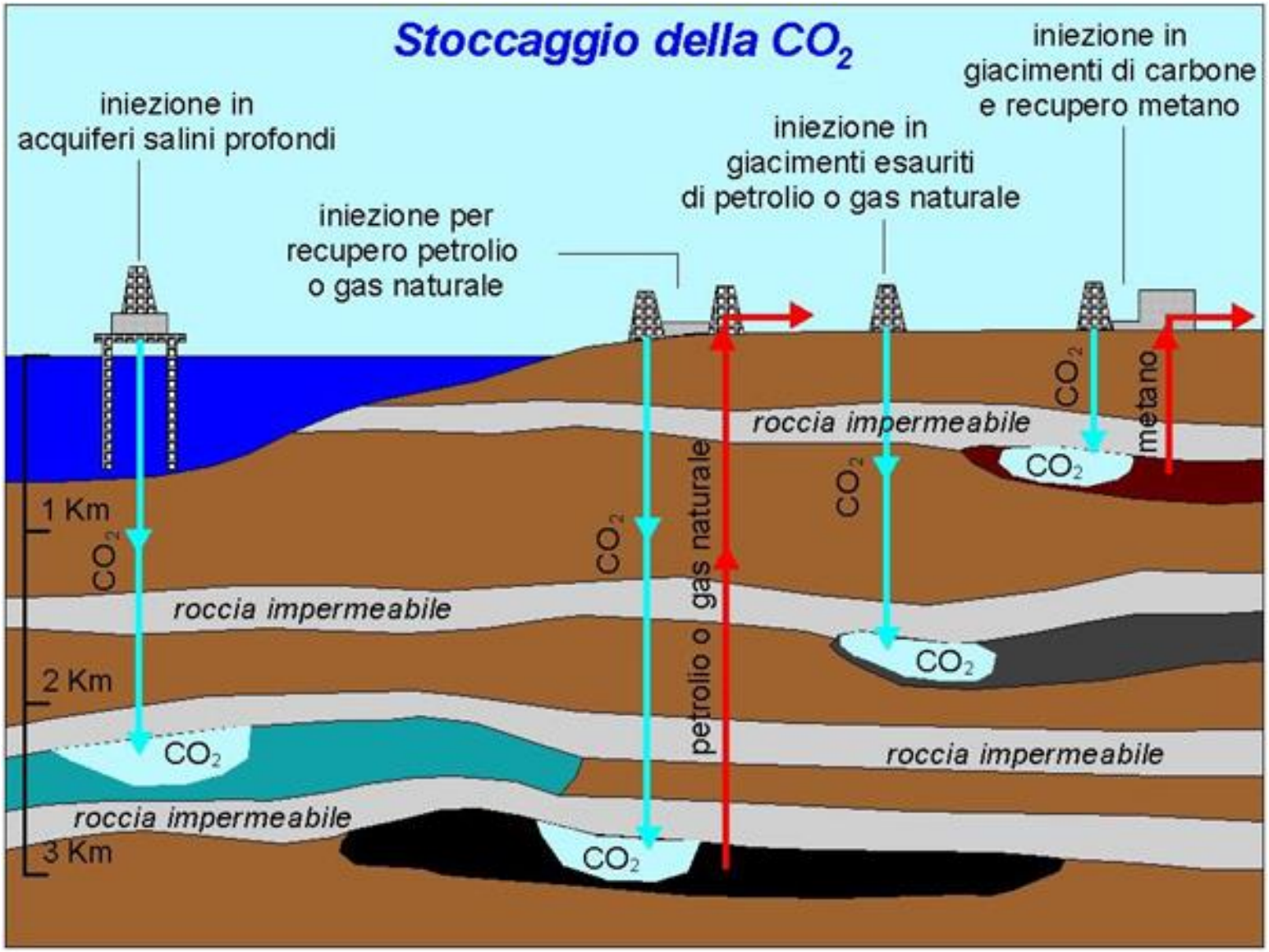
Collaborazioni: Prof. M. F. Brigatti e Dott. D. Malferrari (DSCG, UNIMORE)

Il tasso annuo di crescita della concentrazione di anidride carbonica negli ultimi 50 anni.





Andamento delle variazioni della temperature rispetto al valor medio 1961-1990 (Fonte : WMO, World Meteorogical Organization)

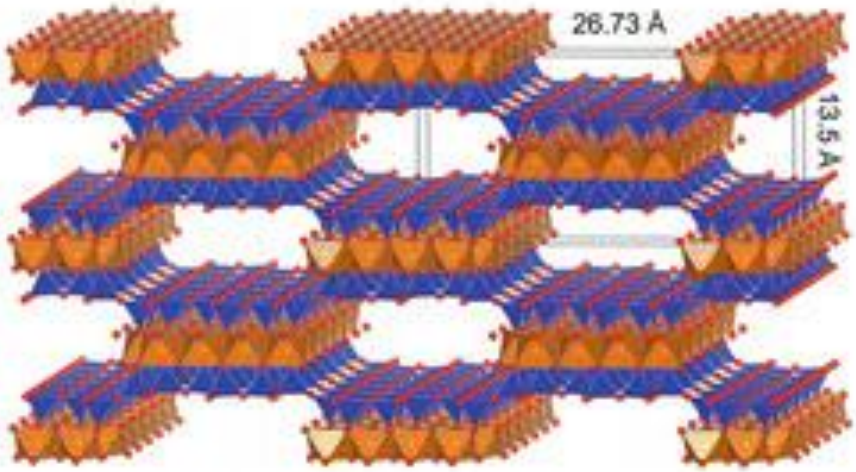

Stoccaggio della CO_2
iniezione in acquiferi salini profondi
iniezione per recupero petrolio o gas naturale
iniezione in giacimenti esauriti di petrolio o gas naturale
iniezione in giacimenti di carbone e recupero metano
1 Km
2 Km
3 Km
CO_2
roccia impermeabile
petrolio o gas naturale
metano

Obiettivo del lavoro di tesi:

1) Valutare il potere assorbente dei fillosiliati modulari (sepiolite e palygorskite) naturali e modificati verso la CO_2.

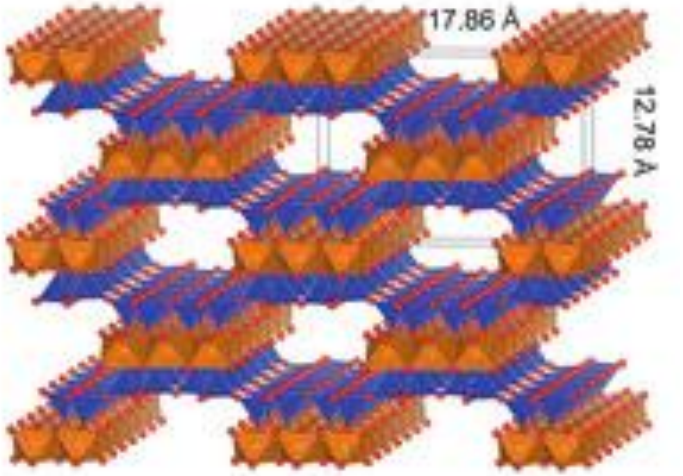
2) Comprendere i meccanismi molecolari alla base della cattura fisica e chimica della CO_2 in questi materiali.

Sepiolite



$Si_{12}O_{30}Mg_8(OH,F)_4(OH_2)_4 \cdot 8H_2O$

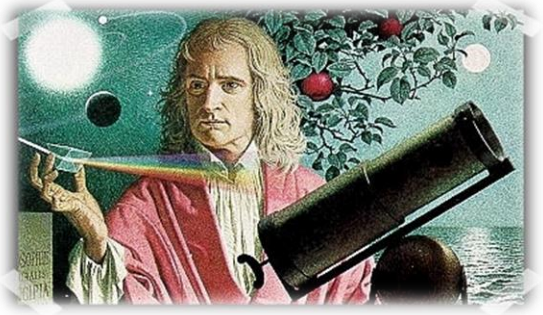
Palygorskite



$Si_8O_{20}Mg_5(OH)_2(OH_2)_4 \cdot 4H_2O$

Le tecniche computazionali che si intendono utilizzare:

Simulazioni di **dinamica molecolare classica** che permette lo studio della struttura di bulk e superficie di sepioliti/palygorskiti con diverse modificazioni e della loro interazione fisica con la CO_2 supercritica in diverse condizioni di pressione e temperatura.



Equazioni di Newton (1687)

$$\frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} = -\frac{\nabla_i U(\mathbf{r})}{m_i}$$