UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2026/2027

GRADO: Doble Grado en Física y Matemáticas

CÓDIGO DEL TFG: 295-014-2026/2027

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Modelado de transporte iónico en procesos de adsorción/desorción en geometrías bidimensionales. Aplicación a la desionización capacitiva y producción de energía.

Descripción general (resumen y metodología):

A escala nanométrica, la gran relación superficie/volumen en un material dado provoca que la superficie sea determinante en muchas de sus propiedades y en un gran número de aplicaciones. Si la superficie adquiere carga eléctrica cuando está en contacto con una disolución, se produce una atracción electrostática entre ella y los iones de signo contrario (contraiones) y repulsión con los del mismo signo (coiones), que se distribuyen en un cierto volumen próximo a la superficie. Al conjunto formado por la superficie y la región con exceso de contraiones y defecto de coiones, se lo conoce como Doble Capa Eléctrica. Su existencia es determinante, no sólo desde el punto de vista fundamental, sino por las aplicaciones o tecnologías relacionadas con ella.

La Doble Capa Eléctrica se caracteriza por tener una muy alta capacidad eléctrica y tiene aplicaciones directas (supercondensadores, por ejemplo) cuando la superficie disponible para almacenar carga es muy grande. Es el caso de electrodos de carbón activado que tienen poros desde unos pocos nanómetros de espesor, idóneos por su alta conductividad, y con superficies específicas del orden de los 1000 m^2/g. Otras aplicaciones que han despertado un gran interés por su carácter medioambiental son la desionización capacitiva (CDI) [1] o la generación de energía por diferencias de salinidad o energía azul (CDP) [2,3]. En estas aplicaciones, las superficies se recubren con una capa de polielectrolito, permeable a los iones y al fluido mejorando la eficiencia de esos procedimientos. En el caso de la desionización permite el paso de unos iones e impide el de otros y si hablamos de energía, la carga depositada en sus cadenas genera una diferencia de potencial entre los electrodos que puede ser aprovechada al intercambiar la salinidad de las disoluciones.

El perfil del potencial eléctrico y la cinética de los iones cerca de la interfase son aspectos claves para predecir su comportamiento y aumentar la eficiencia en los procesos tecnológicos [1]. En este trabajo se pretende realizar un estudio teórico y análisis de datos experimentales de las propiedades eléctricas de las interfases cargadas recubiertas con polielectrolitos de superficies conductoras y a la vez porosas, a partir del estudio simplificado llevado a cabo en [4]. Los citados modelos están formulados en una sección unidimensional de los dispositivos; se propone ampliar estas representaciones a modelos bidimensionales, que permitan tener en cuenta la entrada y salida de flujos a través del dispositivo. Esto debe permitir describir de forma más realista ciclos de adsorción-desorción y contrastar los resultados con la aplicación a procesos de desionización capacitiva.

Para llevar a cabo lo anterior, en primer lugar se hará una revisión bibliográfica acerca del tema que se irá ampliando a medida que se desarrolle el trabajo.

El trabajo comenzará con los aspectos teóricos. Se elaborará un modelo teórico para el transporte de iones desde la disolución, pasando por los canales de tamaño macrométricos donde se supone que se adhiere la capa polimérica, hasta el interior de los nanoporos (de unos pocos nanómetros). Se incorporará también la dinámica de flujos entrantes y salientes.

Se pretende resolver las ecuaciones que gobiernan el sistema usando cálculo numérico. Finalmente, se interpretarán los resultados de ciclos de adsorción y desorción de acuerdo con las predicciones del modelo teórico, y se evaluará el rol del recubrimiento del polielectrolito.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

1. Estudio de la estructura de la Doble Capa Eléctrica de superficies conductoras y porosas recubiertas de polielectrolito.
2. Estudio de procedimientos de aproximación numérica adaptados a la casuística esperada.
3. Resolución por medio de cálculo numérico de las ecuaciones que gobiernan el sistema para predecir el perfil del potencial eléctrico de la superficie del electrodo y la distribución de iones en los poros del mismo.
4. Análisis de los resultados experimentales de adsorción/desorción usando electrodos recubiertos de polielectrolitos y acuerdo con las predicciones teóricas.

Bibliografía básica:

[1] S. Ahualli, G.R. Iglesias, M.M. Fernandez, M.L. Jimenez, A.V. Delgado, Use of Soft Electrodes in Capacitive Deionization of Solutions, Environmental Science & Technology, 51 (2017) 5326-5333.
[2] S. Ahualli, M.L. Jimenez, M.M. Fernandez, G. Iglesias, D. Brogioli, A.V. Delgado, Physical Chemistry Chemical Physics 16 (46) (2014) 25241-25246.

[3] D. Brogioli, Physical Review Letters, 103 (5) (2009).

[4] J.A. Lirio-Piñar, J. Calvo, S. Ahualli, Model and simulations of the effects of polyelectrolyte coated electrodes in Capacitive Deionization. Physical Review E 110 (2024), 034610.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: JUAN CALVO YAGÜE

Ámbito de conocimiento/Departamento: MATEMÁTICA APLICADA

Correo electrónico: juancalvo@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos: SILVIA ALEJANDRA AHUALLI YAPUR

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA APLICADA

Correo electrónico: sahualli@ugr.es

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: ALBERTO SANCHEZ MARTINEZ

Correo electrónico: albertosanmar@correo.ugr.es