

ÖZET

Türkçe ve İngilizce özetlerin projenin (a) **kariyer geliştirme potansiyeli**, (b) önemi, (c) özgün değeri, (d) araştırma sorusu veya hipotezi, (e) amaç ve hedefleri, (f) yöntemi ve (g) yaygın etkisinin ana hatlarını kapsamaları beklenir. Türkçe özet 450, İngilizce özet ise 600 kelime ile sınırlandırılmalıdır. Bu bölümün en son yazılması önerilir.

Proje Özeti

Tüklenen enerji kaynakları, artan nüfus ve özellikle ihtiyaç duyulan temiz enerji dünyanın enerji ihtiyacı alanında alarm seviyesine gelmesine sebep olmuştur. Hidrojenin yüksek enerji içeriği, çevre dostu, hafif ve çeşitli kaynaklardan elde edilebilir olması dikkatlerin üzerine çekilmesine, bilimsel ve endüstriyel çalışmaların hızla yoğunlaşmasına neden olmuştur. Ancak hidrojenin yüksek saflıkta üretilmemesi, üretim aşamasından sonra istenmeyen gazların uzaklaştırılması gerekliliğini doğurmuştur. Hidrojenin ürettiği kaynağa ve prosese bağlı olarak hidrojen beraberinde önemli miktarda CO₂ ve düşük miktarlarda CO, CH₄ ve H₂S getirir. Dolayısıyla hidrojen üretimi gaz ayırma sürecinden bağımsız düşünülemez. Düşük maliyetli, yüksek verimli ve yüksek saflıkta gaz üretimi gaz ayırma için membran teknolojilerinin kullanımını gerekli kılmaktadır. Son zamanlarda sürekli faz olarak polimerlerin ve dağınık (disperse) faz olarak çeşitli inorganik malzemelerin kullanıldığı karışık matrisli membranlar (KMM) üretilmektedir. KMM'lerdeki ayırıcı tabakanın kalınlığı 1 mikrondan az olması istendiğinden, bu tabakaya yerleştirilen inorganik malzemelerin nano boyutta olması ve polimer ile inorganik malzeme arasında boşluklar oluşmaması istenir. İki boyutlu (2D) malzemeler nano boyutta sentezlerinin nispeten kolay olması ve kolaylıkla KMM'lerde dağıtılabilmelerinden dolayı tercih edilmektedir. Son on yıl içerisinde keşfedilmiş özgün 2D nanomalzeme olan MXene ailesinden Ti₃C₂T_x'in hidrojen ayırma performansı var olan diğer malzemelere göre üstünlük göstermiştir. Ti₃C₂T_x'in hidrojen ayırmadaki başarısının literatürdeki sınırlı sayıda çalışma ile açıklanmaya çalışıldığını ve yüzlerce farklı MXene çeşidinin gaz ayırma kapasitelerinin bilinmediğini göz önüne alırsak, hidrojen ayırma için en yüksek performans sergileyen MXene çeşidinin belirlenmesinin ivedilikle ele alınması gereklidir.

Bu projenin amacı, hızla birçok alanda kullanım potansiyeli bularak çeşitli gelişmelere imza atmış olan MXene çeşitlerinin hidrojen ayırma performanslarının moleküler seviyede belirlenmesidir. Sentezlenmiş ve hipotetik olarak ortaya atılmış bütün MXene çeşitleri toplanıp yapıları optimize edilerek MXene Kütüphanesi oluşturulacaktır. MXene ailesinin her ferdinin adsorban performans ölçütleri ile membran geçirgenlik ve seçicilik katsayıları H₂/CO₂ gaz ayırma için hesaplanacaktır. Böylece zaman ve maliyet tasarrufu yaparak moleküler simülasyon yaklaşımıyla bütün MXene çeşitlerinin gaz ayırma performansı hesaplanacak ve en iyisinin belirlenmesi için hızlı bir ön eleme çalışması gerçekleştirilecektir. Taranan bütün MXene çeşitlerinden en iyi hidrojen ayırma veren belirlenmesi deneysel çalışmalara ışık tutacaktır. Ancak daha detaylı inceleme ve gaz ayırma mekanizmasının ortaya konulması amacıyla en iyi üç MXene çeşidi, deneysel sistemlere daha yakın sonuç veren fakat daha uzun sürdüğü için maliyetli olan simülasyon yöntemleriyle incelenecektir. Proje bulguları hem membran teknolojisinin hem de bu teknolojinin kullanıldığı hidrojen üretimi gibi diğer alanların gelişimini sağlayacaktır.

Yürütücü gerçekleştireceği bu özgün çalışma ile akademik kariyerinde membran teknolojisine katkılar sağlamayı ve yeni keşfedilen MXene ailesinin gelişiminde yer almayı hedeflemektedir. Projenin çıktıları grubun web sayfası üzerinden yayınlanarak MXene çeşitlerinin hidrojen üretimindeki potansiyeli dünya biliminin dikkatine sunulacaktır. Yürütücü ilerleyen çalışmalarında, yüksek performans sergilenen MXene çeşitlerinin gaz ayırma potansiyelinin deneysel olarak incelenmesi için yeni bir proje önermeyi planlamaktadır. Bunun yanında, MXene'nin gaz ayırmadaki yerinin ortaya konulmasıyla farklı ayırma uygulamaları için gerek yurtiçi gerekse yurtdışında çeşitli ortaklıkların kurulması planlanmaktadır.

Anahtar Kelimeler: Hidrojen üretimi; gaz ayırma membranları; MXene nanomalzeme; moleküler simülasyon;



Title : Molecular investigation of hydrogen separation potential of MXene nanomaterials for efficient and economical energy production

Summary

Depleted energy sources, continuous growth of the world population, and especially increasing demand for “clean” and efficient energy made the world come to the alarm level for the energy requirement. Since hydrogen has a high energetic efficiency and zero carbon emission, and is produced from a wide range of resources, it received considerable attention and caused rapid intensification of scientific and industrial studies. However, due to the high-purity requirements of various potential applications where hydrogen is used, the requirement of downstream separation processes becomes apparent. Depending on the resource and process where hydrogen is produced, it can contain considerable amount of CO₂, and low amount of CO, CH₄, and H₂S. Therefore, hydrogen production cannot be considered independent from the gas separation process. Since low cost, high efficiency, and purity are required in gas separation, membrane technology is a promising technology due to its simplicity of operation and low energy consumption, cost-effectiveness, and environmental friendly features. Recently, mixed matrix membranes (MMM) have been fabricated by combining a continuous polymeric phase and an inorganic dispersed phase. Inorganic materials should be synthesized in nano size in order to be able to produce thin (less than 1 micron) selective layers and avoid gaps between polymeric and inorganic phases. This could be addressed by constructing the material in 2D form to produce an ultrathin MMM with less than 1µm thickness. A novel nanomaterial discovered in the past decade, Ti₃C₂T_x from MXene family, revealed superior hydrogen separation performance within the 2D nanomaterial families. If we consider the success of Ti₃C₂T_x in hydrogen separation introduced by the limited number of studies in the literature and the availability of hundreds of different MXene types to be investigated for the hydrogen separation, this issue needs to be dealt with urgently.

The purpose of this project is to investigate the hydrogen separation potential of MXenes at molecular level which rapidly enables identification of the feasible use in many areas and undertake various developments. The aim of this project is to create a MXene library which includes both existing and hypothetical MXene structures and optimize them. Adsorbent performance metrics and membrane separation properties as permeability and selectivity of each MXene for H₂/CO₂ gas separation will be computed. Therefore, this high throughput computational study will enable us to screen all MXene types to define their hydrogen separation potential with a cost- and time-effective manner. Identification of top performing MXene types for hydrogen separation will guide and encourage the experimental studies. However, in order to investigate in detail and reveal the gas separation mechanism of MXene types, gas fluxes of three top performing MXenes will be computed by more complex model which exactly represents experimental conditions. Output of this project will help to improve the membrane technology as well as the other application areas such as hydrogen production where membrane technologies are used.

Project principal investigator, with this novel study, aims to make significant contributions to membrane technologies in her academic career and take part in the development of the newly discovered MXene family. The potential of MXenes in hydrogen separation will be presented to the attention of scientific and engineering community by publishing the outputs on the group webpage. The principal investigator also plans to propose a new project in the near future about the measurement of hydrogen separation potential of top performing MXene types proposed by this high throughput computational screening project. In addition, it is aimed to collaborate with both national and international scientists to identify the potential of MXene materials in other separation areas.

Keywords: Hydrogen production; membrane-based gas separation; MXene nanomaterials; molecular simulations