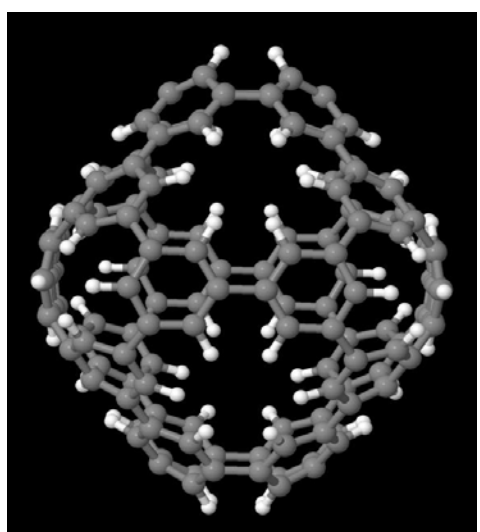


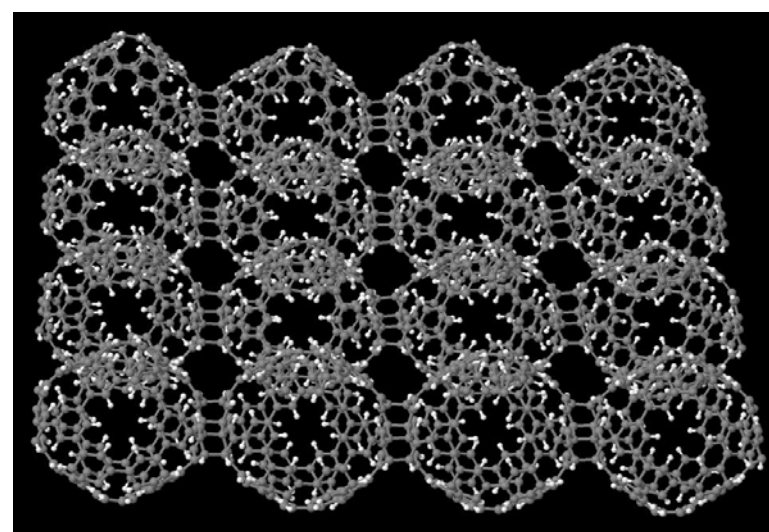
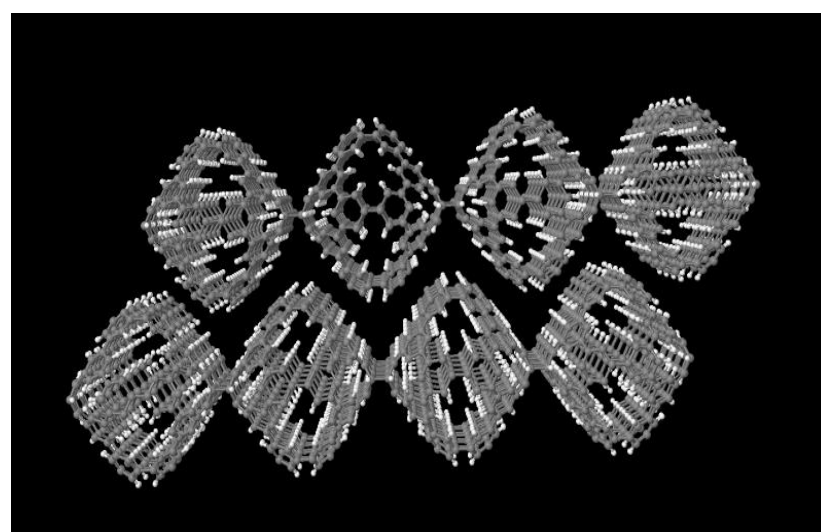
Introdução e Objetivos

- Uma nova família de materiais nanoporosos foi recentemente introduzida, chamada de fulerenos porosos (Paupitz et al, Phys. Chem. Chem. Phys. 2014, 16, 25515). Nosso grupo propôs a criação de estruturas nanoporosas bi e tridimensionais utilizando esses fulerenos como bloco de construção.

Exemplo de fulereno poroso

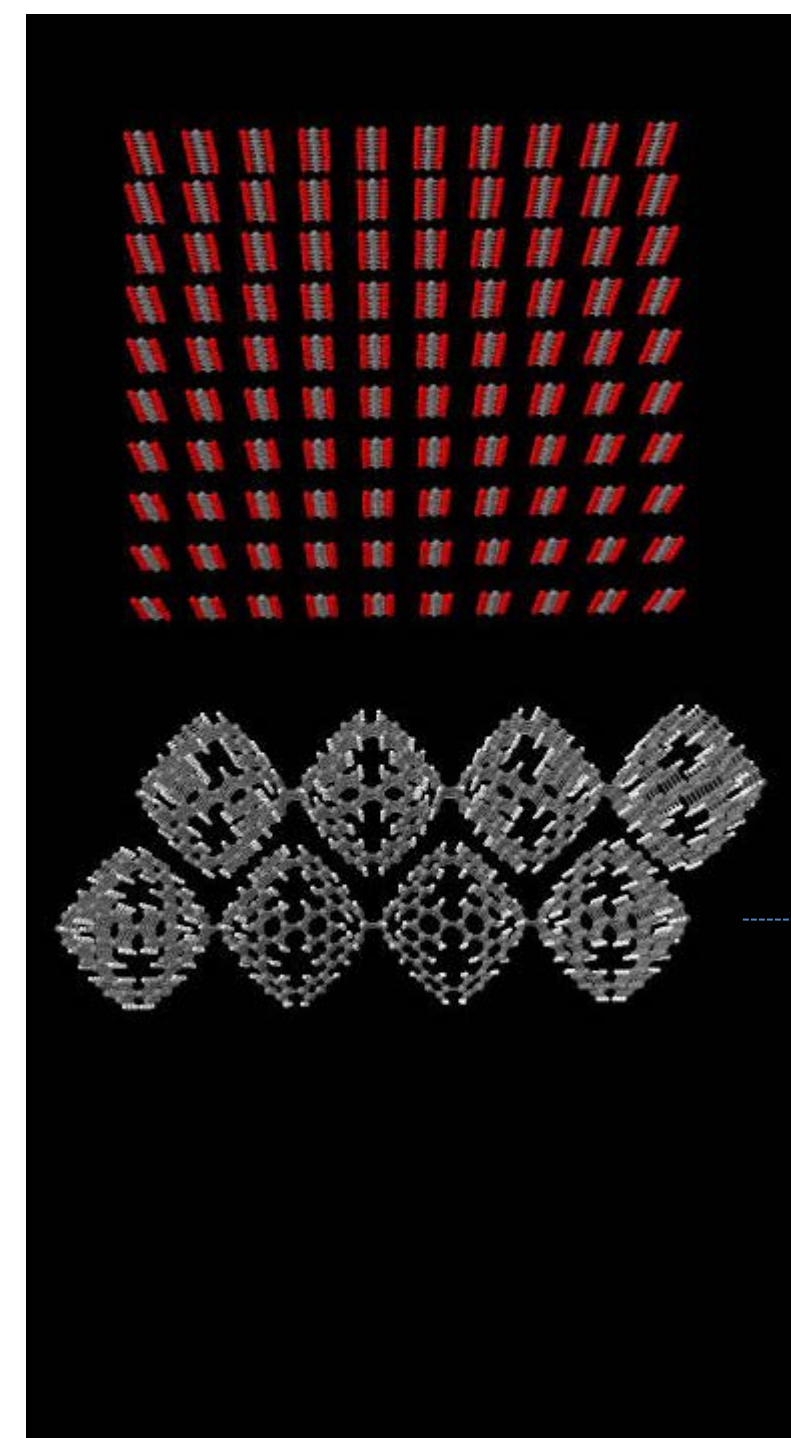


Exemplos de estruturas porosas formadas pela coalescência de fulerenos



- O objetivo desse trabalho é avaliar o desempenho desses materiais quando aplicados em processos de separação de gases, devido ao fato de combinar leveza, resistência mecânica, uma elevada razão área/volume, e distribuição de diâmetros uniforme.

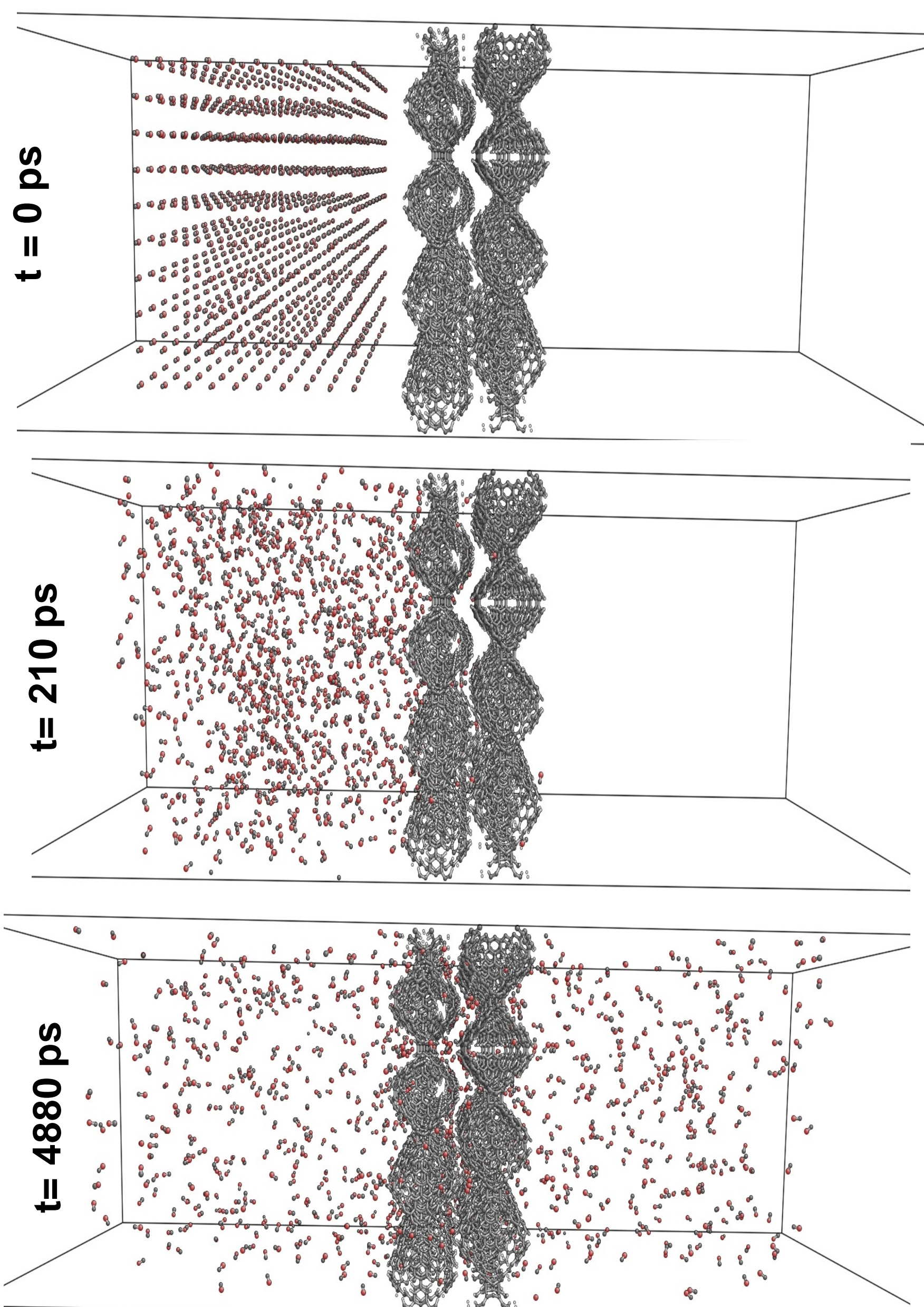
Metodologia



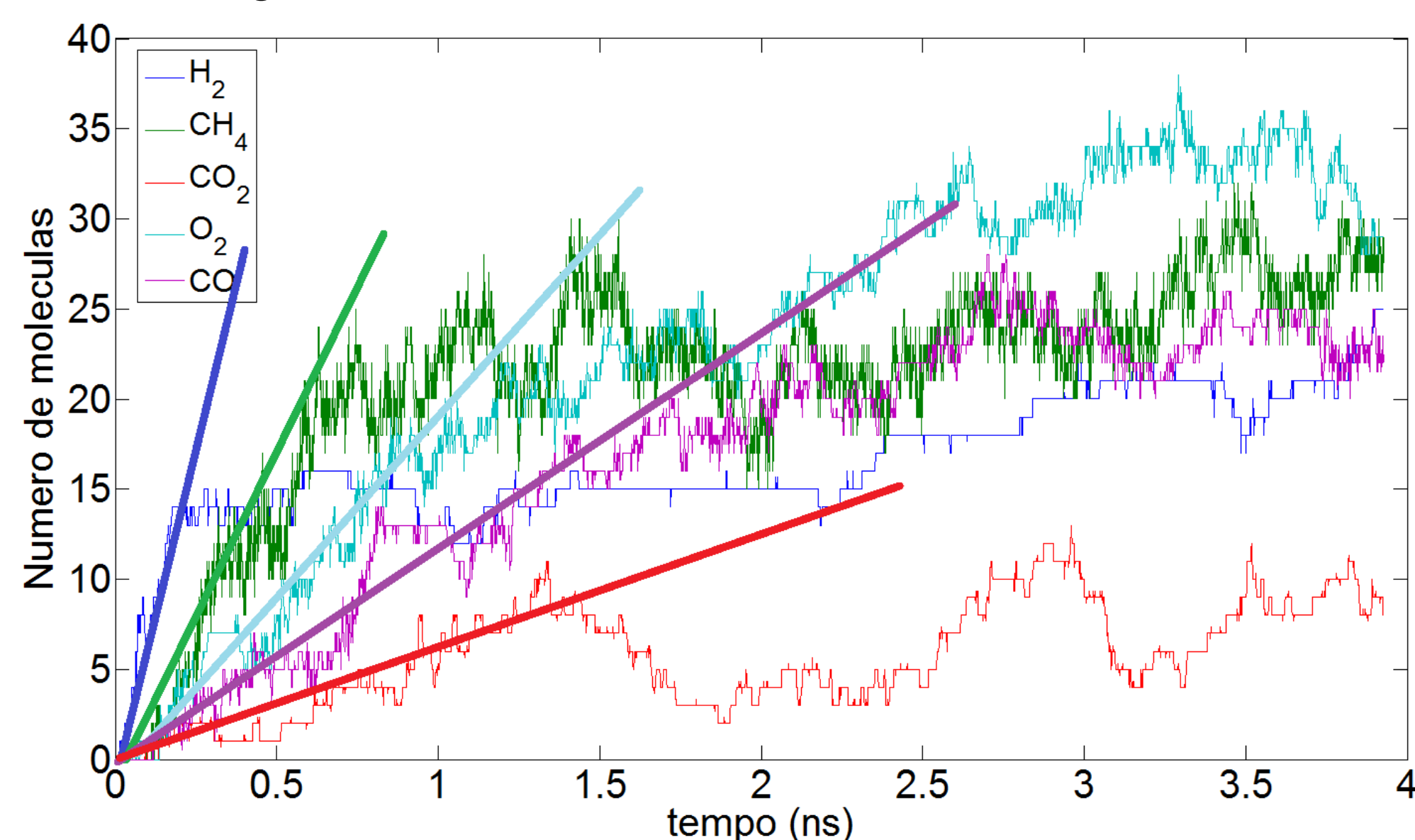
- Foram realizadas simulações de dinâmica molecular (conduzidas no software LAMMPS) referente ao processo de difusão dos gases H_2 , CO_2 , CO , CH_4 , O_2 e N_2 através da membrana. As interações intermoleculares são descritas usando o potencial de Lennard-Jones.
- Nas simulações foram criados dois reservatórios, um preenchido com as moléculas e outro vazio, separados pela membrana. Realizou-se a contagem das moléculas que atravessam a membrana em função do tempo, determinando-se a taxa de transferência de cada espécie e diferentes seletividades.
- Modificando a distância entre os dois planos da membranas, foram obtidas quatro membranas com diâmetro de poro distintos.

Resultados

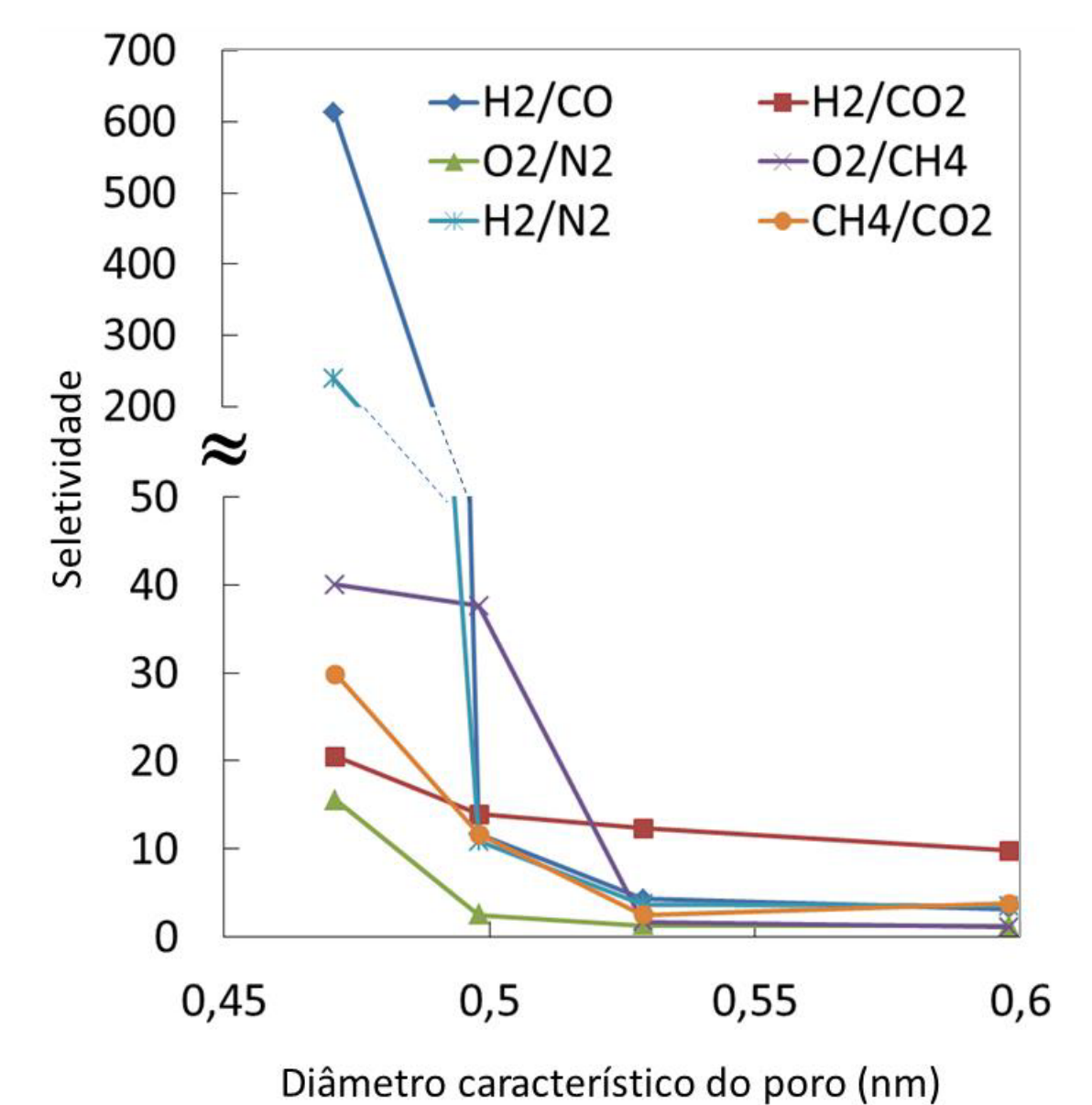
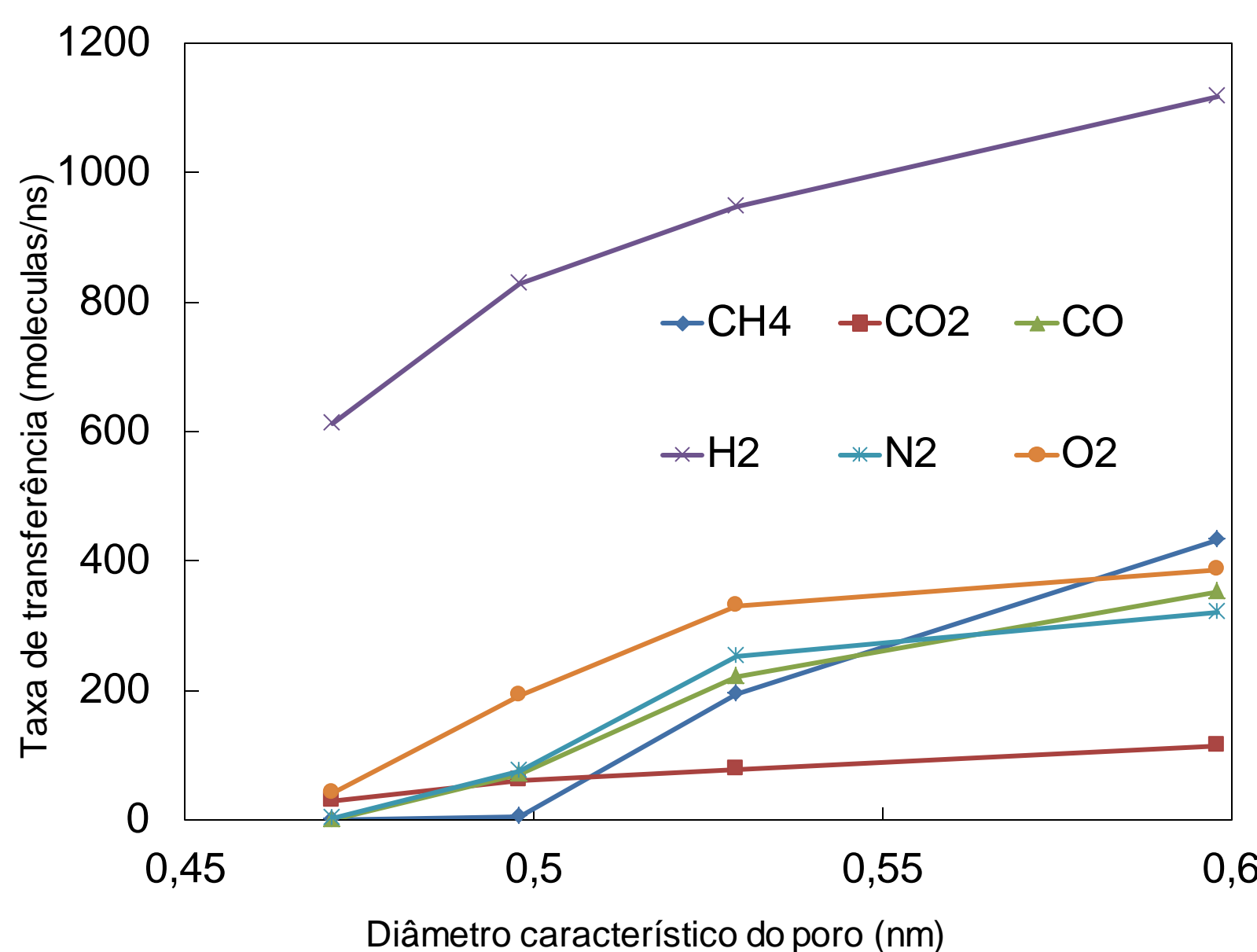
Estados observados em uma simulação do processo de difusão de CO_2 pela membrana



- A taxa inicial de transferência de cada gás na membrana foi calculada através de regressão linear da curva referente ao número de moléculas que atravessaram a membrana em função do tempo, ilustradas no gráfico abaixo.



- Os cálculos das taxas foram realizados para as membranas de diferentes porosidades. Nos gráficos abaixo são reportadas as taxas de transferência e as seletividades obtidas.



Conclusões

Os resultados mostram que as nanoestruturas formadas pela coalescência de fulerenos porosos podem atuar como membranas de alta seletividade, apresentando potencial de aplicação na purificação de correntes gasosas, visando por exemplo a remoção de gases que contribuem para o efeito estufa (CO_2), e separação de gases que apresentam grande potencial energético (H_2). A seletividade da membrana pode ser controlada através da variação da densidade da mesma.