



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



| | |
|-------------------|---|
| Evento | Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| Ano | 2016 |
| Local | Campus do Vale - UFRGS |
| Título | Aplicação de Simulação Molecular no Estudo de Separação de Gases usando Nanoestruturas de Carbono |
| Autor | RAFAELA ALBERTI PAGNUSSATTI |
| Orientador | ANDRE RODRIGUES MUNIZ |

Aplicação de Simulação Molecular no Estudo de Separação de Gases usando Nanoestruturas de Carbono

Rafaela Alberti Pagnussatti e André Rodrigues Muniz

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Materiais nanoporosos são materiais caracterizados por apresentarem poros com diâmetros menores que 100nm, serem leves e apresentarem boa estabilidade mecânica. Essas propriedades permitem que eles tenham um grande potencial para aplicação em diversas áreas, como por exemplo, na separação e adsorção de gases, armazenamento de energia e catálise. Os fulerenos porosos são nanoestruturas de carbono que apresentam formato de gaiola e porosidade variada, recentemente introduzidas na literatura. Nesse trabalho são utilizadas simulações de dinâmica molecular clássica para o cálculo de propriedades de transporte de gases em fulerenos porosos e estruturas derivadas, com o objetivo de analisar o desempenho destes no processo de separação e armazenamento de gases. As simulações iniciais consistiram no cálculo de energia de ativação associado ao caminho de difusão de diferentes gases (N_2 , CH_4 , H_2 , CO) nos poros das estruturas, visto que esta energia está diretamente ligada com a difusividade desses gases na membrana. Desta forma pode-se comparar a facilidade com que cada espécie difunde pelo material. Na sequência, conduzimos simulações dinâmicas referentes à separação de diferentes misturas de gases, de forma a avaliar a permeabilidade e seletividade destes materiais porosos atuando como uma membrana. As propriedades estimadas mostram que esses materiais podem atuar como membranas de alta seletividade, com potencial de aplicação na purificação de correntes gasosas, visando remoção ou armazenamento de gases que contribuem para o efeito estufa, (como por exemplo o CO_2), assim como separar gases que tem grande potencial energético, como por exemplo o H_2 , que é uma fonte de energia limpa. Essa análise computacional permite entender detalhadamente a relação entre a estrutura e as propriedades de transporte do material, fornecendo detalhes a respeito dos mecanismos envolvidos durante o processo de difusão pela membrana.