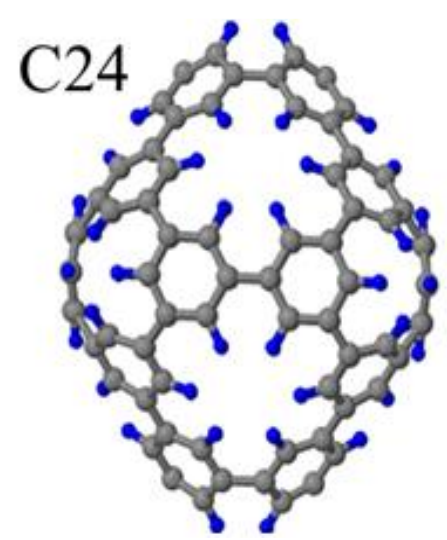


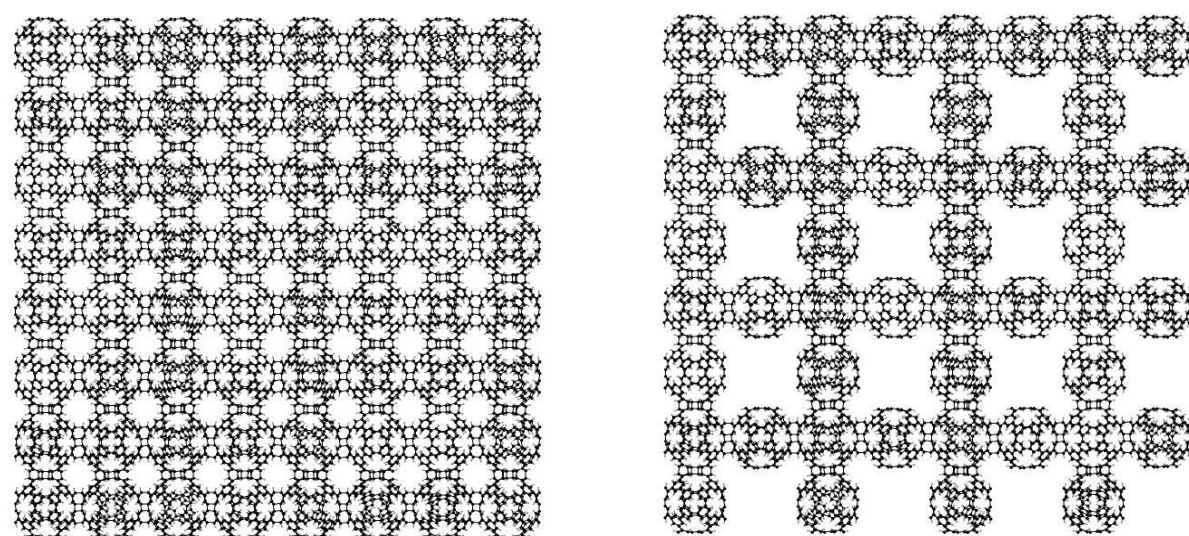
## Fulerenos Porosos

- Uma nova família de materiais nanoporosos, formada a partir do grafeno poroso, foi recentemente introduzida, chamada de fulerenos porosos (Paupitz R. 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.

### Fulereo poroso



### Estruturas formadas pela coalescência de fulerenos

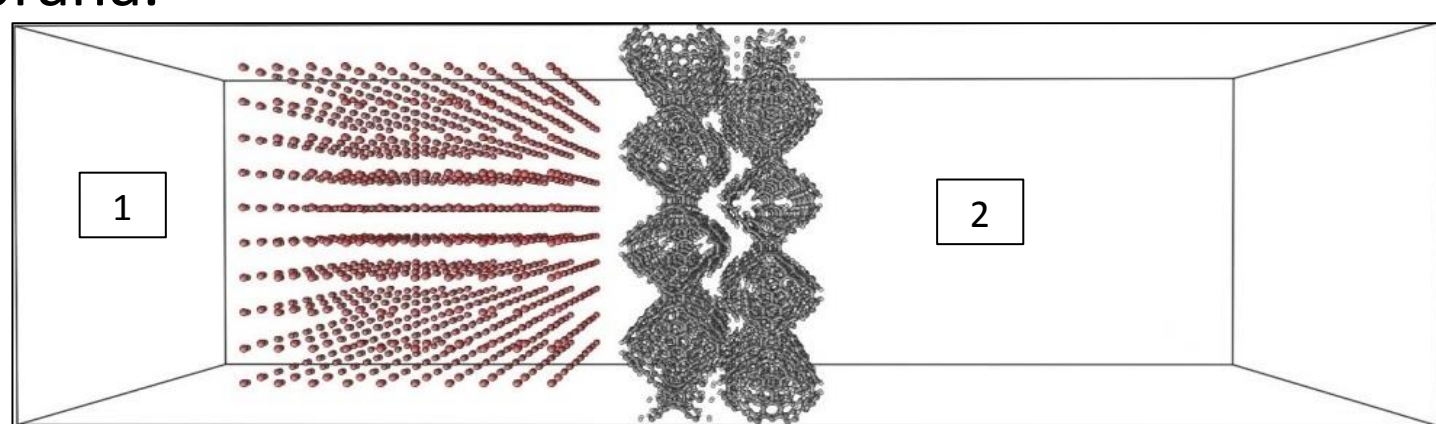


## Objetivo

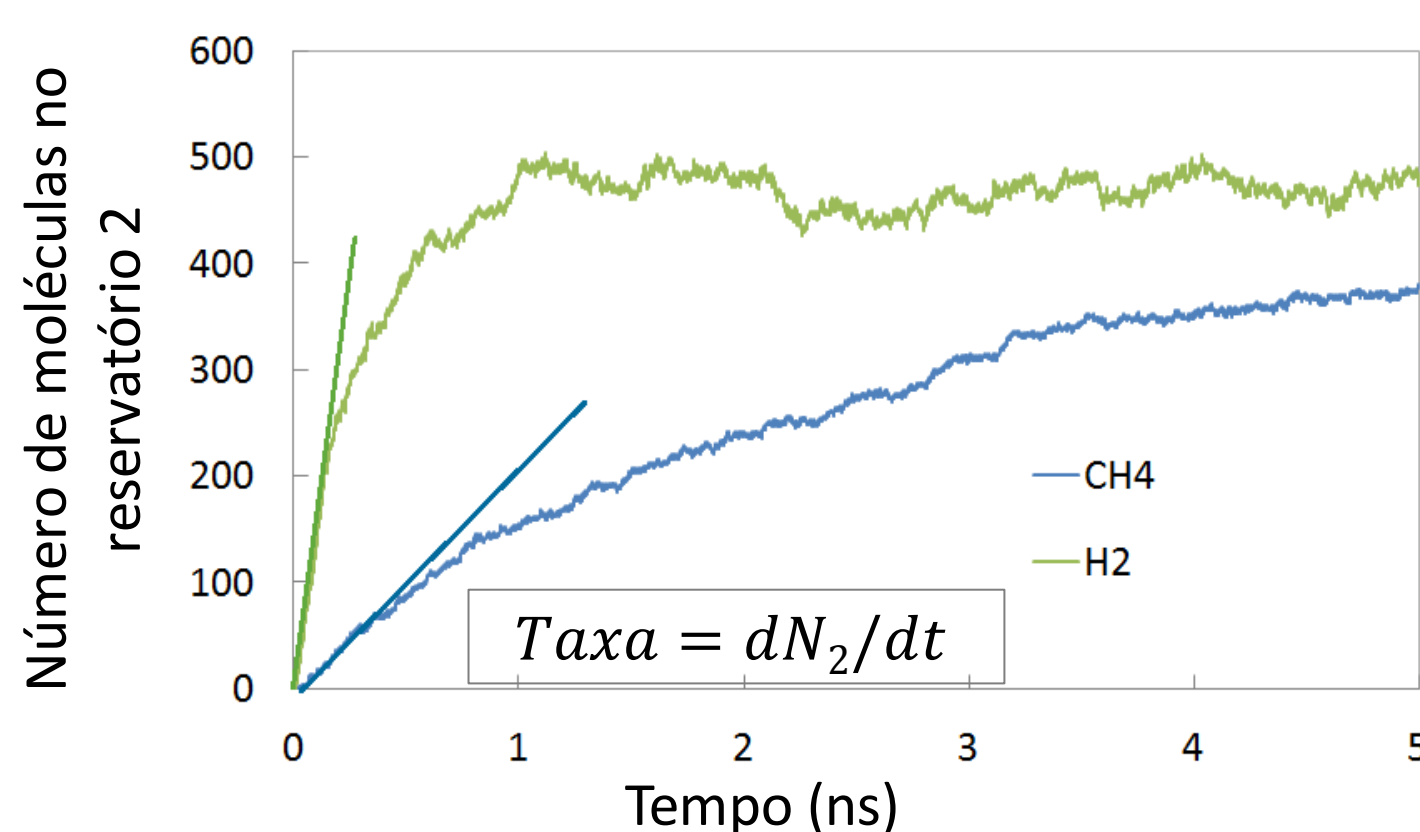
- O objetivo desse trabalho é avaliar o desempenho dessas estruturas quando aplicadas em processos de separação de gases, devido ao fato de combinarem leveza, resistência mecânica, uma elevada razão área/volume, e distribuição de diâmetros uniforme.

## Metodologia

- Foram criadas membranas empilhando de dois a quatro planos formados por fulerenos, e variando a distância entre os planos.
- Foram realizadas simulações de dinâmica molecular (conduzidas no software LAMMPS) referente ao processo de difusão dos gases H<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub> e N<sub>2</sub> através das membranas. As interações intermoleculares são descritas usando o potencial de Lennard-Jones e Coulomb.
- Nas simulações foram criados dois reservatórios, um preenchido com as moléculas e outro vazio, separados pela membrana.

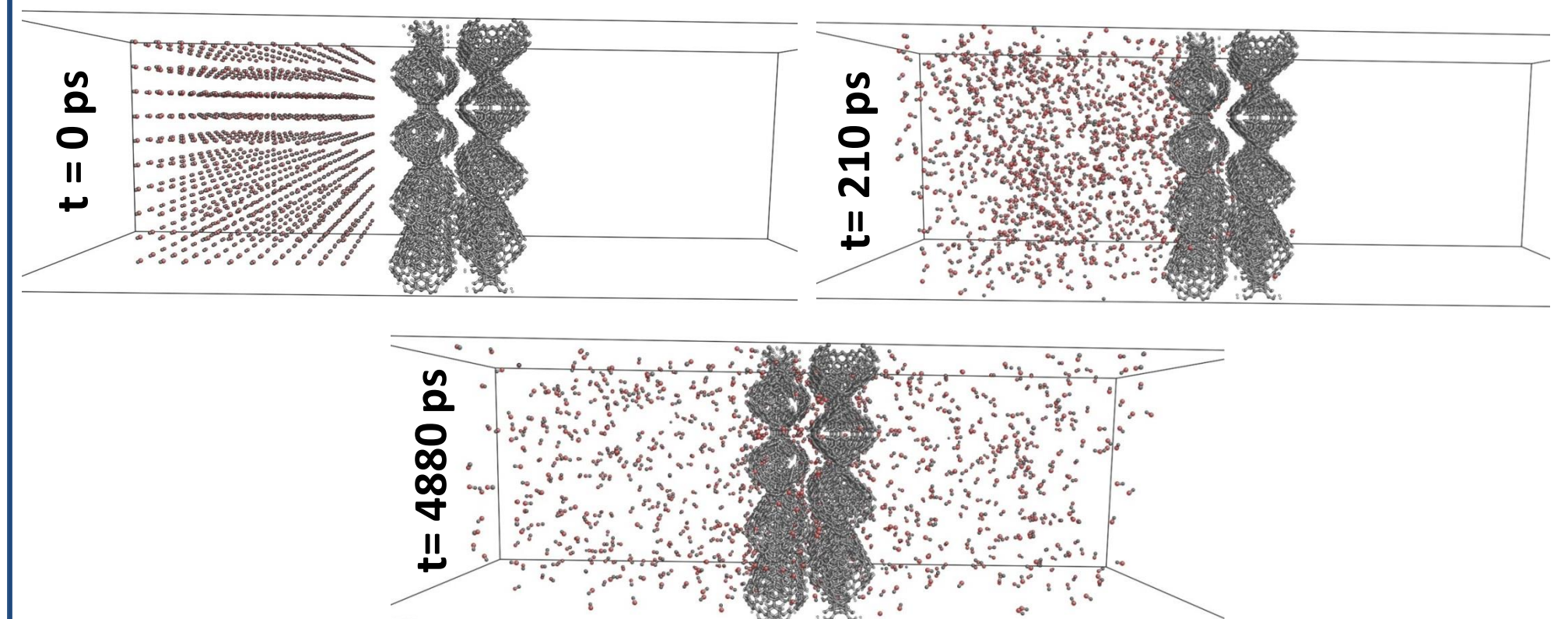


- Realizou-se a **contagem do número de moléculas (N)** em cada reservatório em função do tempo, determinando-se a **taxa de transferência** de cada espécie.

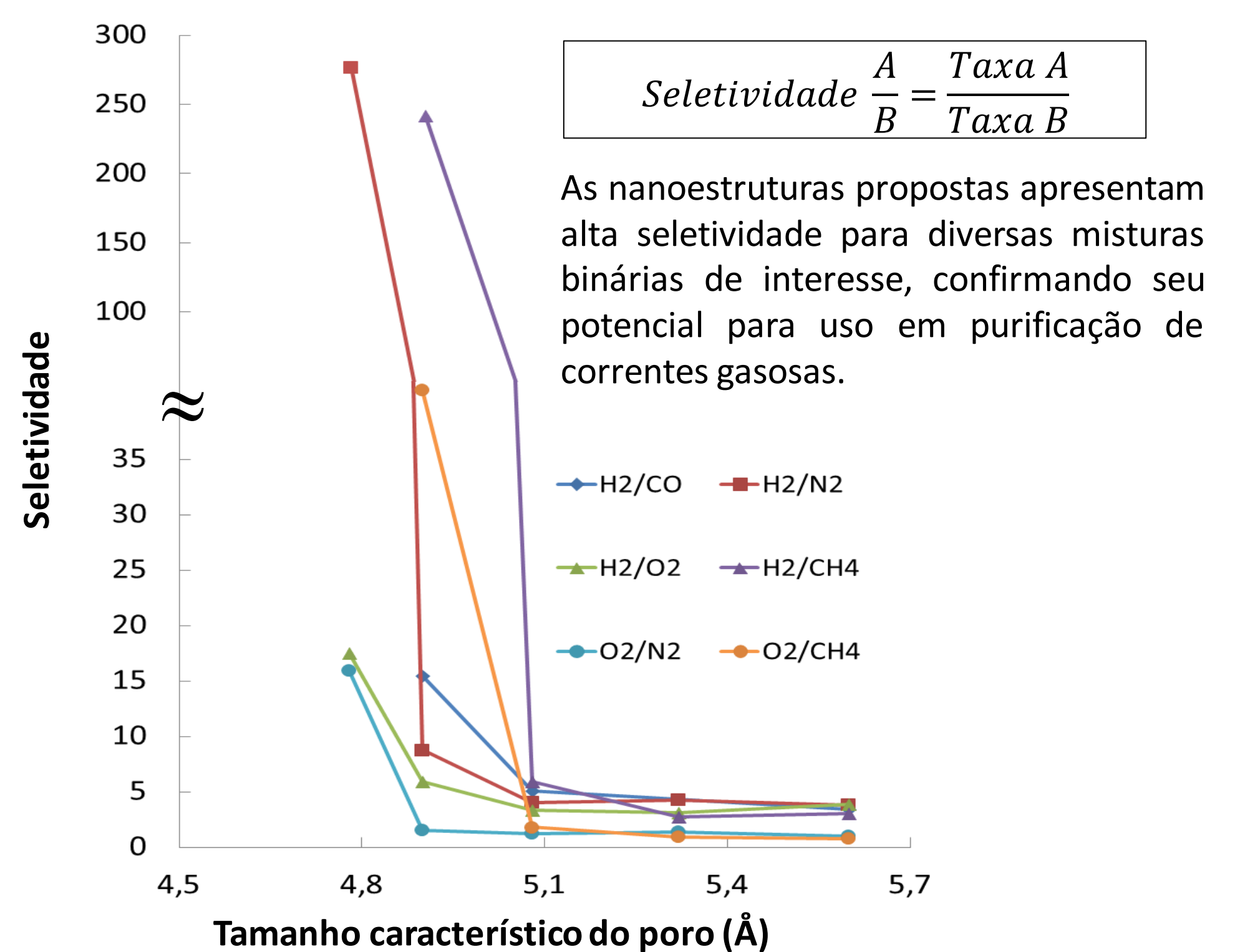
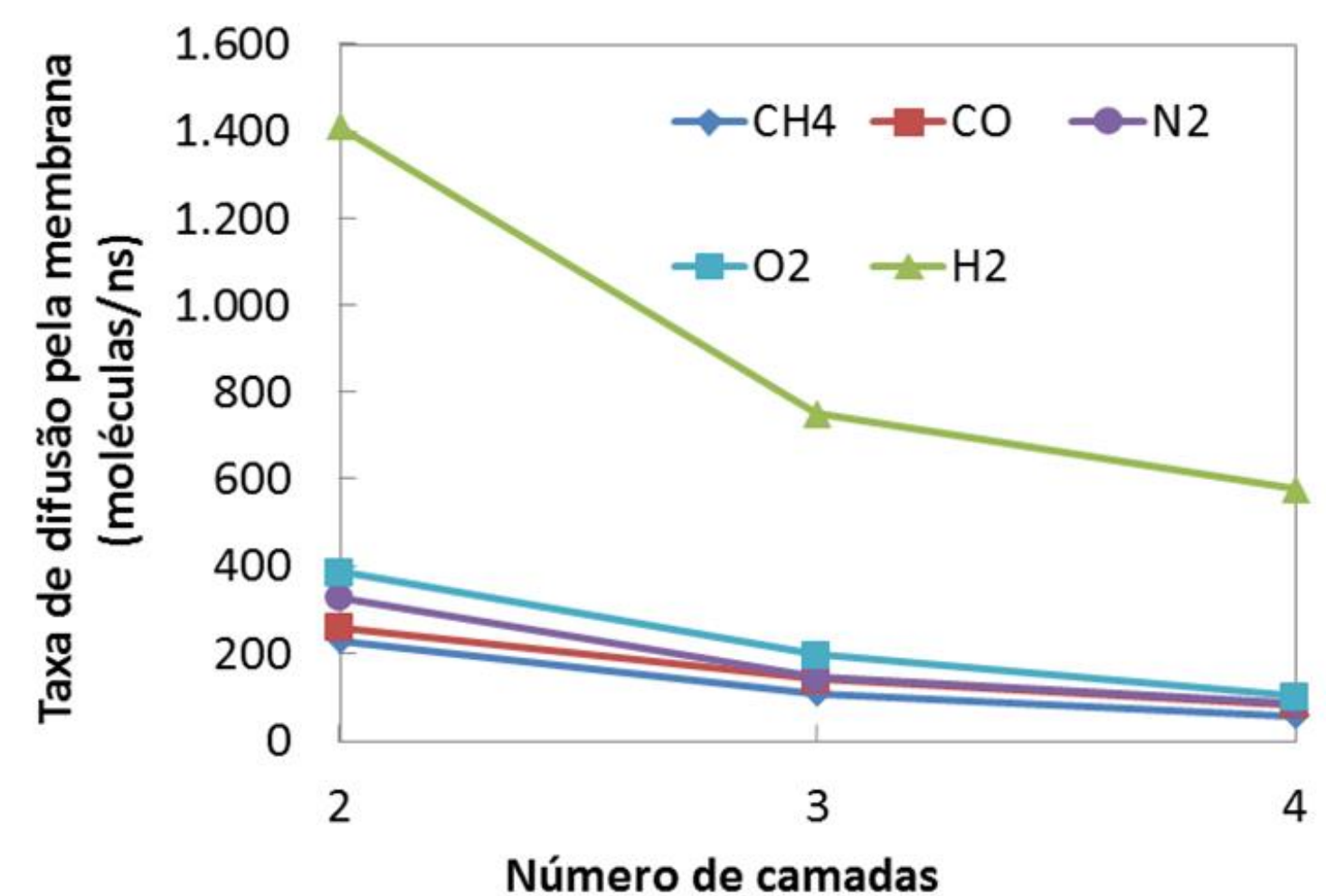


## Resultados

Estados observados em uma simulação do processo de difusão de CO<sub>2</sub> pela membrana:



- A taxa de transferência dos gases é determinada pelo tamanho das moléculas dos gases.
- Ordem de Diâmetro cinético** : H<sub>2</sub> < O<sub>2</sub> < N<sub>2</sub> < CO < CH<sub>4</sub>.



## Conclusão

A combinação de alta seletividade, associada a excelente resistência mecânica e estabilidade térmica demonstrada em estudos anteriores, mostram que estes materiais nanoporosos podem ser usados na criação de membranas de alto desempenho para separação de gases, adequadas às condições típicas de T e P em processos industriais.