

SALÃO DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXIX SIC

UFRGS
PROPESQ



múltipla 
UNIVERSIDADE
inovadora  inspiradora

Evento	Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2017
Local	Campus do Vale
Título	SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE GASES EM NANOESTRUTURAS POROSAS DE CARBONO
Autor	RAFAELA ALBERTI PAGNUSSATTI
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE GASES EM NANOESTRUTURAS POROSAS DE CARBONO

RAFAELA A. PAGNUSSATTI, ANDRÉ R. MUNIZ

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

Materiais nanoporosos são materiais que tipicamente apresentam poros de diâmetro inferiores a 100 nm, e possuem propriedades, como leveza, elevada razão área/volume, e a possibilidade de apresentar uma distribuição de diâmetros uniforme, que permitem a sua aplicação em diversos processos como em separação de gases, adsorção, catálise, armazenamento de energia, e sensores. Há uma busca contínua no desenvolvimento de novos materiais que apresentem alta estabilidade mecânica e química e que apresentem distribuição de diâmetros de poros e características de superfície que atendam as especificações necessárias para uma determinada aplicação. Recentemente, novas estruturas porosas, derivadas dos fulerenos porosos, foram propostas pelo nosso grupo. Foram geradas estruturas com várias porosidades, que apresentam resistência mecânica elevada e uma superfície porosa com distribuição de diâmetros uniforme, o que atribui a essas estruturas um grande potencial para serem aplicadas a processos de separação e armazenamento de gases. Neste trabalho, avaliamos o potencial de aplicação dessas nanoestruturas nos processos de separação de gases. Simulações de dinâmica molecular clássica são aplicadas para calcular propriedades de transporte de gases nessas estruturas, com o objetivo de analisar o desempenho destas como peneiras moleculares. Estas simulações permitem determinar as taxas de transporte de diversos gases (CH_4 , CO , O_2 , N_2 , H_2), através das nanoestruturas porosas, e a partir destas, as seletividades correspondentes para diferentes pares de substâncias de interesse prático (CO/H_2 , CH_4/H_2 , O_2/N_2 ...). As propriedades estimadas mostram que esses materiais podem atuar como membranas de alta seletividade, com potencial de aplicação na purificação de correntes gasosas em processos industriais.