



| | |
|-------------------|---|
| Evento | Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| Ano | 2022 |
| Local | Campus Centro - UFRGS |
| Título | Caracterização da viscosidade de líquidos iônicos para armazenamento de energia solar térmica |
| Autor | CATHARINA BENDER RODRIGUES |
| Orientador | JONES DE ANDRADE |

A predominância do uso de sais inorgânicos no armazenamento da energia solar térmica traz problemas devido à recristalização dos sais à temperaturas relativamente elevadas, limitando sua eficiência e viabilidade econômica. Dentre as propostas alternativas mais promissoras para a otimização deste processo estão os líquidos iônicos (ILs), que possuem temperaturas de fusão mais baixas e muitas outras características atrativas como a *quasi*-não-volatilidade (solucionando o problema de armazenamento). Por isso, estudaram-se anteriormente modelagens distintas de alguns ILs através da dinâmica molecular, para avaliar sua aplicabilidade para este fim levando em conta diferentes propriedades. Essa fase exploratória anterior detectou maiores problemas para a determinação adequada da viscosidade por métodos mais tradicionais. Sendo assim, desenvolveu-se um programa, utilizando do método aplicado no artigo “*Reliable Viscosity Calculation from Equilibrium Molecular Dynamics Simulations: A Time Decomposition Method*” de Zhang, Otani e Maginn, para cálculo das viscosidades de ILs modelo, formados por nove combinações dos cátions $EMIm^+$, $BMIm^+$ e $HMIm^+$, e dos ânions $AlCl_4^-$, BF_4^- e TfO^- , cada combinação sendo avaliada em quatro modelos de cargas pontuais diferentes. O programa desenvolvido executa múltiplas vezes o GROMACS (*GRO*ningen *MA*chine for *C*hemical *S*imulations), pacote responsável pela simulação das corridas e determinação da viscosidade por função de correlação temporal. Ao fim de cada corrida, são calculados a média e o desvio padrão das funções obtidas a cada passo de tempo; este desvio é ajustado em uma função exponencial (Ae^b), onde o parâmetro b é usado na função peso ($1/t^b$) para o cálculo da média ponderada, a qual é ajustada em uma dupla exponencial $A\alpha\tau_1(1 - e^{-t/\tau_1}) + A(1 - \alpha)\tau_2(1 - e^{-t/\tau_2})$. A viscosidade do líquido para cada conjunto de corridas é dada pelo limite dessa equação. Este processo se repete até que a diferença na viscosidade obtida entre dois conjuntos consecutivos de corridas seja menor que a tolerância estabelecida.