

Estudo do Armazenamento de H₂ Combustível em Zeólitas Através de Dinâmica Molecular

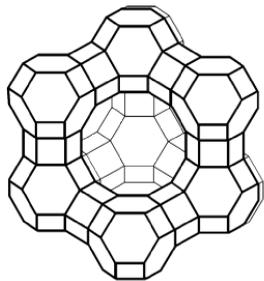
Diego P. Oliveira
oliveira.diego.p@gmail.com

Charles R. A. Abreu
abreu@eq.ufrj.br

Introdução

As zeólitas são cristais microporosos de aluminossilicatos, cuja carga negativa é contrabalanceada por cátions móveis. Os microporos possuem grande área de contato e alta capacidade adsortiva, que pode ser explorada em diferentes aplicações, incluindo o armazenamento de gases.

O desenvolvimento recente de métodos computacionais eficientes criou uma poderosa ferramenta que possibilita a modelagem dos sistemas adsortivos em escala molecular, bem como o cálculo de parâmetros termodinâmicos relevantes.



Figuras 1 e 2: Microestrutura de faujasita e cristal de faujasita mineral

Objetivos

Desenvolvimento de procedimento para modelagem e simulação de sistemas adsortivos com zeólitas no pacote LAMMPS, capaz de representar o sistema dinâmico completo de zeólita, adsorbato e cátions de compensação, e computar variáveis termodinâmicas relevantes.

Métodos

- Dinâmica Molecular: Solução das equações do movimento para cada átomo do sistema
- LAMMPS: Software de simulação em código aberto e distribuição livre
- Forças intermoleculares: Lennard-Jones e Coulomb
- PACKLAMMPS: Formação da caixa de simulação, otimização PACKMOL
- Integrações canônicas: Temperatura constante no sistema

Modelo

- Zeólita: Faujasita, matriz rígida
- Acidez: Modelo do átomo "T"
- Cátions de Compensação: Na⁺
- Adsorbato: Hidrogênio
- C. de contorno periódicas

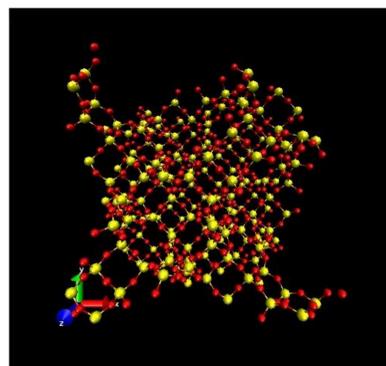
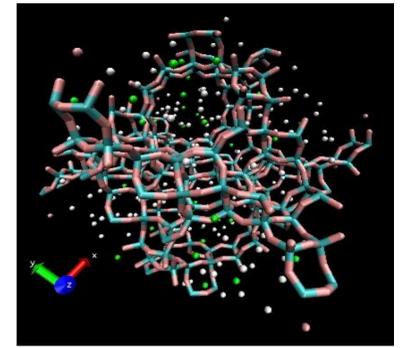
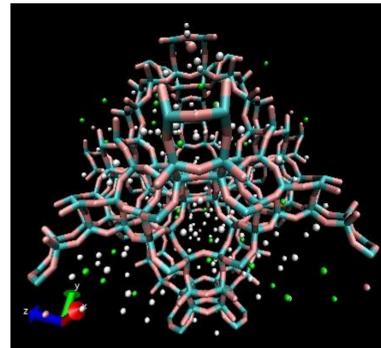


Figura 3: Célula unitária de faujasita modelada

Resultados



Figuras 4 e 5: Sistema completo (zeólita, cátions e hidrogênio) simulado

- Aprisionamento na Sodalita (β)
- Cátions estáveis na estrutura
- Átomos "T" sem a componente de Lennard-Jones
- Tempo de estabilização: 5000-20000 fs
- Tempo total é função de T e Np

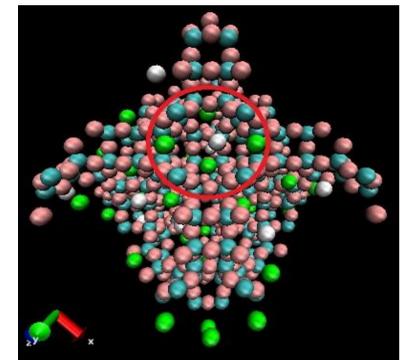


Figura 6: Aprisionamento de gás na sodalita

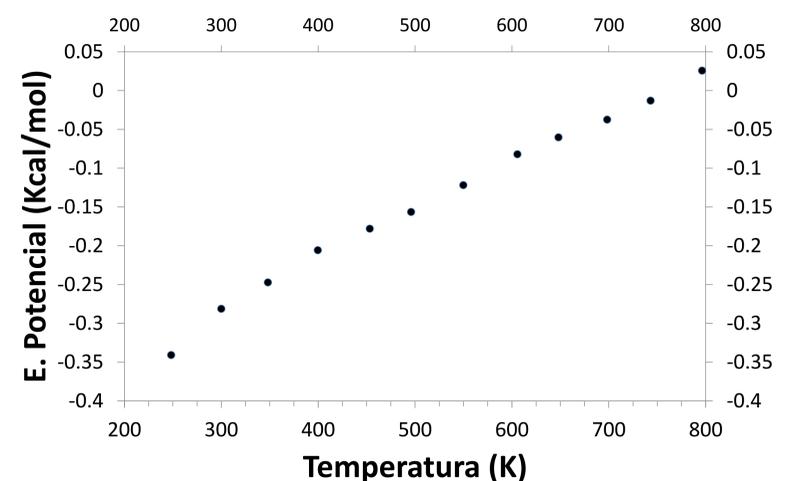


Figura 7: Energias potenciais (calores de adsorção) das moléculas de hidrogênio

Conclusões

O modelo simulado mostrou-se válido para o cálculo de grandezas termodinâmicas no sistema adsortivo. O comportamento esperado de estabilização dos cátions foi observado, bem como do aprisionamento de hidrogênio na sodalita.

A metodologia desenvolvida pode ser aplicada na avaliação de calores de adsorção de outros gases e expandida para o cálculo de energia livre dos adsorbato a partir de ajustes no modelo de simulação.

Apoio: