



T1306

ESTUDO DE ISOTERMAS DE ADSORÇÃO DE H₂ EM ZEÓLITAS ATRAVÉS DE DINÂMICA MOLECULAR

Diego Pereira de Oliveira (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Charlles Rubber de A. Abreu (Orientador), Faculdade de Engenharia Química - FEQ, UNICAMP

A crescente preocupação com o manejo sustentável de recursos naturais impulsiona o desenvolvimento de tecnologias em energia limpa. O hidrogênio possui grande potencial neste aspecto, porém a dificuldade em seu armazenamento, por sua grande inflamabilidade, é o principal gargalo para aplicação do gás como combustível em atividades cotidianas. Visando evitar as altas pressões necessárias para estoque do H₂, têm-se pesquisado o uso de materiais adsorvivos para apreensão do gás. As zeólitas são aluminossilicatos microporosos reconhecidas por sua capacidade de adsorção, sendo uma alternativa viável no armazenamento de gases. Utilizando o software de simulação LAMMPS, foi realizada expansão do estudo desenvolvido anteriormente pelos autores deste projeto, visando à obtenção das isotermas de adsorção do hidrogênio em faujasitas. A rotina de simulação original foi adaptada, possibilitando a avaliação da variação da energia potencial com um parâmetro de acoplamento representando uma partícula fantasma. Com os resultados obtidos e aplicando-se o método de Integração Termodinâmica, pretende-se calcular a variação da energia livre do sistema por adição ou remoção de partículas, permitindo a construção das isotermas de adsorção para o sistema estudado.

Simulação - Zeólitas - Adsorção