



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
Título	ESTUDO DAS PROPRIEDADES DE TRANSPORTE DE MEMBRANAS DE CARBONO VIA SIMULAÇÕES DE DINÂMICA MOLECULAR
Autor	MATHEUS TEIXEIRA NOVÔA
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

ESTUDO DAS PROPRIEDADES DE TRANSPORTE DE MEMBRANAS DE CARBONO VIA SIMULAÇÕES DE DINÂMICA MOLECULAR

Autor: Matheus Teixeira Novôa
Orientador: André Rodrigues Muniz

Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

As membranas de carbono pertencem à uma classe muito promissora de materiais, as peneiras moleculares. Estas possuem boa capacidade de separação de misturas gasosas, baseada na diferença de tamanho molecular das espécies presentes. O objetivo deste trabalho é aplicar simulações de dinâmica molecular (MD) para determinar as propriedades de transporte de gases em um modelo 3D realista de uma membrana de carbono à base de polieterimida (PEI), e analisar sua dependência com as características estruturais. Os modelos atomísticos da membrana foram construídos a partir de um pré-existente concebido em um trabalho anterior do nosso grupo de pesquisa. A partir deste, foram montadas duas estruturas com diferentes densidades (1,0 e 1,2 g/cm³), sendo então preenchidos com diferentes quantidades de moléculas, relacionadas a uma dada pressão de equilíbrio do sólido com um reservatório de gás. Nesta primeira análise, empregou-se o metano sob pressões de 5, 10, 25 e 100 bar. Simulações MD foram então conduzidas e as propriedades de transporte foram calculadas, monitorando-se as trajetórias das moléculas ao longo do tempo. Dentre as propriedades de interesse que foram determinadas, estão os coeficientes de autodifusão, difusividade corrigida e difusividade de transporte. O coeficiente de autodifusão particularmente é calculado a partir da determinação do deslocamento quadrático médio (MSD) das moléculas, obtido diretamente das simulações. A difusividade corrigida é obtida de forma semelhante, e com esta é possível calcular a difusividade de transporte, a qual pode ser diretamente correlacionada com medidas experimentais. Os resultados obtidos até então apontam uma tendência de aumento da difusividade de transporte com a pressão, enquanto que as outras duas apresentam uma tendência de queda, conforme verificado na literatura para materiais similares. Futuramente, estes resultados serão comparados e validados com medidas experimentais de permeação de gases em membranas reais.