Armazenamento e liberação de H₂

Em nosso trabalho, utilizamos o programa Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) para analisar se a deformação poderia ser utilizada para liberar gases adsorvidos em materiais 2D. Para determinar se isto era possível, primeiro examinamos se o puxamento alterava a interação entre o gás adsorvido e quatro estruturas: grafeno, α -grafino, β -grafino e γ -grafino. Para isto, inserimos uma molécula de H₂ a uma altura z da superfície de cada material, e alteramos a sua posição para determinar a energia de interação ao longo de toda a superfície. A análise dos resultados revelou que o esticamento reduziu a interação atrativa entre o H₂ e todos os materiais 2D investigados. Para confirmar que a quantidade de gás adsorvida seria diferente na presença de deformação, realizamos simulações de Monte Carlo no ensemble Grande canônico, para estruturas com e sem deformação.

Aluno de:

Mestrado

Referências bibliográficas

WANG, K. et al. Comparative studies of adsorption capacities for graphene based sorbents with different potential functions in molecular simulations. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 41, n. 18, p. 7419–7424, 2016. ISSN 0360-3199. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319915318498>.

WANG, Q.; JOHNSON, J. K. Molecular simulation of hydrogen adsorption in single-walled carbon nanotubes and idealized carbon slit pores. *The Journal of Chemical Physics*, v. 110, n. 1, p. 577–586, 1999. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.478114>

XU, B. et al. Li-decorated graphyne as high-capacity hydrogen storage media: First-principles plane wave calculations. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 39, n. 30, p. 17104–17111, 2014. ISSN 0360-3199. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319914023337>.

Author: Mr BENJAMIM, Raphael

Co-author: Prof. MACHADO, Leonardo Dantas

Presenter: Mr BENJAMIM, Raphael