



Contribution ID: 1239
compétition)

Type: Oral (Student, In Competition) / Orale (Étudiant(e), inscrit à la

Adsorption d'hydrogène dans des adsorbants microporeux : Étude numérique des propriétés thermodynamiques

Wednesday 15 June 2016 14:00 (15 minutes)

En raison de sa faible densité ambiante, le stockage de l'hydrogène à l'état pur (comme dans l'état gaz ou liquide) nécessite des conditions thermodynamiques difficiles. Le stockage d'hydrogène basé sur les matériaux constitue un moyen efficace de réduire les exigences thermodynamiques afin d'atteindre des densités de stockage importantes pour les systèmes énergétiques. Par exemple, la physisorption d'hydrogène sur des adsorbants fortement microporeux a été largement étudiée pour les applications de véhicules. Puisque les adsorbants courants donnent des résultats d'adsorption intéressants seulement à température cryogénique (~100 K) et que les processus d'adsorption peuvent causer des changements thermiques significatifs, la modélisation de système de stockage basé sur l'adsorption nécessite la connaissance des équations d'états du phénomène d'adsorption sur une grande plage de conditions thermodynamique.

La simulation informatique de la physique statistique basée sur la méthode Monte Carlo permet de calculer les isothermes d'adsorption pour un adsorbant cristallin idéal dont les paramètres des interactions adsorbant-adsorbant sont correctement paramétrés. En raison de leur surface accessible élevée, de leur forte microporosité et de leurs propriétés poreuses modulables, les structures métallo-organique ont été largement étudiées comme matériaux pour le stockage d'hydrogène par cryosorption.

Dans ce travail, nous examinons la limite de densité des isothermes d'adsorption de l'hydrogène sur le MOF-5 et le CuBTC afin de guider les critères nécessaires à l'optimisation du stockage par physisorption. Différentes propriétés physiques et thermodynamiques de ces adsorbants sont étudiées comme le volume poreux, la surface spécifique, les fonctions de distributions radiales, les sites d'adsorptions et les isothermes d'adsorptions et de densité à l'intérieur des pores de l'adsorbant. Les propriétés thermodynamiques sont calculées en utilisant des simulations Grand Canonique Monte Carlo basées sur les intégrales de parcours pour la plage de pression 0-150 atm dans les états sous-critiques et super-critiques à 30, 50, 77, 113, 196 et 296 K.

Author: Mr DURETTE, David (UQTR)

Co-author: Dr BÉNARD, Pierre (UQTR)

Presenter: Mr DURETTE, David (UQTR)

Session Classification: W2-5 Thin Films II (DCMMP-DSS) / Couches minces II (DPMCM-DSS)

Track Classification: Condensed Matter and Materials Physics / Physique de la matière condensée et matériaux (DCMMP-DPMCM)