



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Simulação Computacional de Líquidos Iônicos para Armazenamento de Energia Solar Térmica
Autor	SAMUEL HUFF DIETERICH
Orientador	JONES DE ANDRADE

Simulação Computacional de Líquidos Iônicos para Armazenamento de Energia Solar Térmica

Autor: Samuel Huff Dieterich

Orientador: Prof. Dr. Jones de Andrade

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Um limitante para a utilização de energias renováveis é a sua dependência climática e, no caso específico da energia solar, a sua sazonalidade diurno-noturna. A fim de contornar essa situação, diferentes formas de armazenamento energético tem sido estudadas. No que tange a energia solar térmica, o uso de sais inorgânicos fundidos têm sido a principal opção, utilizando a energia térmica previamente acumulada durante o período de luz solar indisponível. Contudo, essa solução apresenta limitações, em função da recristalização do sal que ocorre ainda a temperaturas relativamente altas (reduzindo a eficiência da troca de energia) e da corrosão dos tanques, o que diminui a viabilidade econômica das usinas. Por esse motivo, objetivou-se estudar a aplicabilidade de líquidos iônicos como alternativas a esses sais, minimizando essas dificuldades, a partir de técnicas da química computacional. Para tanto, exploraram-se as propriedades dos líquidos iônicos formados por cátions da família Imidazólio e ânions Tetracloroaluminato, Triflato e Tetrafluorborato a partir de simulações de Dinâmica Molecular utilizando o software GROMACS. Nessas simulações foram realizadas etapas de equilíbrio, para estabilização do sistema, e de aquisição de trajetórias, para posterior análise, com os líquidos iônicos formados da combinação dos ânions citados com os cátions 1-Etil-3-Metilimidazólio, 1-*n*-Butil-3-Metilimidazólio e 1-*n*-Hexil-3-Metilimidazólio, em quatro modelos de carga, totalizando 36 sistemas distintos. A partir dessa fase exploratória, em comparação com os dados experimentais disponíveis, os resultados indicam que as técnicas de análise das trajetórias obtidas por simulações de dinâmica molecular empregadas são viáveis para o cálculo das propriedades de interesse: Densidade, Difusão, Viscosidade e Capacidade Calorífica Molar Isobárica. Contudo, ainda são necessários aprimoramentos da descrição das interações eletrostáticas para a determinação das propriedades de transporte dos líquidos iônicos, tanto em formas puras quanto misturas, visando encontrar candidatos para o armazenamento de energia solar térmica.