**Simulación computacional del transporte de hidrogeno**

**Estado del Arte**

**El contexto**

La preocupación por el cambio climático está aumentando debido al calentamiento global. Las emisiones de dióxido de carbono debidas al consumo de energía deben reducirse lo antes posible. (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara, & Nishimura, 2022)

Para evitar la fragilización por hidrógeno y otros daños causados ​​por el hidrógeno durante el transporte de hidrógeno mediante tuberías de metal, es posible transportar hidrógeno a través de tuberías de polietileno (PE) no metálico. Sin embargo, la permeación y fuga de gas son más obvias para el suministro de hidrógeno mediante tuberías de PE que para las que utilizan tuberías de metal (Zheng, y otros, 2022).

La energía del hidrógeno ha sido ampliamente estudiada en los últimos años como una fuente de energía limpia con un gran potencial de desarrollo. Tiene importantes ventajas sobre los combustibles fósiles tradicionales, como ser una fuente de energía limpia, sin carbono, eficiente y renovable y tener varios modos de aplicación. (Zheng, y otros, 2022).

cuando se utilizan tuberías metálicas para transportar H2, se producirán fragilización por hidrógeno y otros daños inducidos por el hidrógeno, lo que puede provocar graves problemas de seguridad (Zheng, y otros, 2022).

existen algunas deficiencias en el estudio de la permeabilidad al H2 en PE mediante métodos experimentales, como un largo período experimental, un alto costo y el riesgo de fuga de gas y explosión. (Zheng, y otros, 2022)

**Sobre el material**

El polietileno (PE) es un material de revestimiento candidato para dispositivos de almacenamiento de tipo IV. (Zhao, y otros, 2022)

La difusión del hidrógeno en el PE se ajusta al mecanismo de “salto”. La molécula de hidrógeno vibra en el poro de volumen libre durante un largo tiempo y luego salta rápidamente a los poros adyacentes para completar la difusión. (Zheng, y otros, 2022).

las tuberías de polietileno (PE) pueden superar eficazmente los problemas asociados con el uso de tuberías de metal, las tuberías de PE tienen las ventajas de ser livianas, fáciles de instalar y de bajo costo. (Zheng, y otros, 2022)

las tuberías de PE son más propensas a la permeación de gas. Como el H2 es un gas inflamable y explosivo, la permeación de gas a largo plazo no solo causa pérdida y desperdicio de energía, sino que también aumenta el riesgo de combustión y explosión después de la permeación y fuga de gas. (Zheng, y otros, 2022)

Para garantizar la seguridad de los dispositivos de almacenamiento y transferencia de hidrógeno comprimido, es necesario garantizar barreras de hidrógeno con un tamaño molecular pequeño utilizando polímeros altamente cristalinos, a diferencia de la tecnología de membrana de separación de gases que utiliza polímeros amorfos. Por lo tanto, es muy importante centrarse en la morfología de los polímeros cristalinos. (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara, & Nishimura, 2022)

**Sobre la permeabilidad**

algunos académicos han estudiado las características de permeabilidad de los gases en PE amorfo utilizando dinámica molecular (MD). (Zheng, y otros, 2022)

Los componentes clave son los recipientes de tipo IV y las mangueras de distribución, que constan de una capa interior polimérica y una capa exterior de refuerzo. Los materiales poliméricos para la capa interior de estos dispositivos tienen intrínsecamente una permeabilidad a los gases comprimidos, incluido el gas hidrógeno, mediante un mecanismo de difusión en solución.

Controlar la permeabilidad mediante el diseño de materiales, especialmente el diseño de la morfología y la estructura de orden superior de los materiales poliméricos, es fundamental para minimizar las pérdidas de combustible por la permeabilidad de los materiales poliméricos para estos dispositivos. (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara, & Nishimura, 2022)

Los materiales informados incluyen [poliestireno](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/chemical-engineering/polystyrene) [[11](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib11),[12](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib12)[], polietileno](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/materials-science/polyethylene" \o "Obtenga más información sobre el polietileno en las páginas de temas generadas por IA de ScienceDirect) de baja densidad [[13](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib13),[14](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib14)], polietileno de alta densidad (HDPE) [[15](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib15)], [polipropileno](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/materials-science/polypropylene) [[16](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib16)], acetato de polivinilo [[17](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib17)], poli (metacrilato de metilo) [[18](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib18)], [poliamida](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/engineering/polyamide) 6 [[19](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib19),[20](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib20)], [alcohol polivinílico](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/chemical-engineering/polyvinyl-alcohol) [[21](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib21)], etc.. (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara, & Nishimura, 2022)

Fujiwara et al. desarrollaron un método de permeabilidad al hidrógeno a alta presión (HPHP) [[[31]](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib31),[[32]](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X" \l "bib32)]. Diseñaron y fabricaron un dispositivo que puede medir con precisión la permeabilidad al hidrógeno de materiales poliméricos en estado estacionario utilizando el método HPHP y reportaron una permeabilidad al gas hidrógeno a alta presión de hasta 100 MPa para polietileno con diferentes cristalinidades. También midieron la permeabilidad de 6 tipos de polietileno utilizando un método de análisis [de desorción térmica](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/chemical-engineering/thermal-desorption) (TDA), que es un método de medición de estado no estacionario en el que la permeabilidad se deriva del [proceso de difusión](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/engineering/diffusion-process)cuando la muestra se expone a la presión atmosférica después de la exposición al hidrógeno a alta presión. (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara, & Nishimura, 2022)

el H 2 es una de las moléculas de gas más pequeñas y tiene una interacción deficiente con los polímeros de poliolefina , lo que da como resultado una permeabilidad a los gases relativamente alta (Zhao, y otros, 2022)

La [región amorfa](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/engineering/amorphous-region) del PE se consideró comúnmente como la ruta principal de difusión de H 2entre la [matriz polimérica,](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/materials-science/polymer-matrix) mientras que la fase cristalizada prohibía la difusión de H 2 con mayor densidad y estructura más compacta [[7](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S0360319922042653" \l "bib7),[[14]](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S0360319922042653#bib14),[[15]](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S0360319922042653#bib15),[[16]](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S0360319922042653#bib16)]. Un avance reciente ha revelado que los diferentes tipos de PE, desde (Zhao, y otros, 2022)

**Sobre la difusión**

La difusión del hidrógeno en el PE se ajusta al mecanismo de “salto”. La molécula de hidrógeno vibra en el poro de volumen libre durante un largo tiempo y luego salta rápidamente a los poros adyacentes para completar la difusión. (Zheng, y otros, 2022).

los diferentes tipos de PE, desde el polietileno de baja densidad (LDPE) hasta el polietileno de peso molecular ultra alto (UHMWPE), pueden tener diferentes rangos de constante de difusión de 1 × 10 −5 a 1 × 10 −7 cm 2 /s (Zhao, y otros, 2022)

**Métodos de análisis y parámetros**

se realizan la simulación de Monte Carlo Gran Canónico y la dinámica molecular. Se investigan las características de solubilidad y difusión del hidrógeno en PE amorfo a temperaturas de 270-310 K y presiones de 0,1-0,7 MPa. También se analizan las influencias de la temperatura y la presión en la permeación (Zheng, y otros, 2022).

los coeficientes de solubilidad, difusión y permeabilidad del hidrógeno en PE amorfo aumentan con el aumento de la temperatura, y sus relaciones con la temperatura son consistentes con la ley de Arrhenius. (Zheng, y otros, 2022).

**Planteamiento del problema**

La preocupación por el cambio climático está aumentando debido al calentamiento global. Las emisiones de dióxido de carbono debidas al consumo de energía deben reducirse lo antes posible. (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara, & Nishimura, 2022)

cuando se utilizan tuberías metálicas para transportar H2, se producirán fragilización por hidrógeno y otros daños inducidos por el hidrógeno, lo que puede provocar graves problemas de seguridad (Zheng, y otros, 2022).

las tuberías de polietileno (PE) pueden superar eficazmente los problemas asociados con el uso de tuberías de metal, las tuberías de PE tienen las ventajas de ser livianas, fáciles de instalar y de bajo costo. (Zheng, y otros, 2022)

las tuberías de PE son más propensas a la permeación de gas . Como el H2 es un gas inflamable y explosivo, la permeación de gas a largo plazo no solo causa pérdida y desperdicio de energía, sino que también aumenta el riesgo de combustión y explosión después de la permeación y fuga de gas. (Zheng, y otros, 2022).

Recientemente se informó sobre un método para evaluar la permeabilidad al hidrógeno de alta presión; sin embargo, el costo de la evaluación es extremadamente alto. Para seleccionar polímeros cristalinos adecuados para sellos de hidrógeno moldeados o dispositivos de barrera, se requiere un método de predicción de la permeabilidad al hidrógeno de alta presión que utilice la estructura del polímero y sus propiedades convencionales. (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara, & Nishimura, 2022)

El combustible de hidrógeno para los FCEV se incorpora como gas hidrógeno comprimido a 70 MPa debido a la baja densidad de energía volumétrica. El sistema de combustible de hidrógeno de los FCEV y de las estaciones de reabastecimiento de hidrógeno (HRS) comprende varios componentes, incluidos recipientes de hidrógeno comprimido y mangueras de distribución, válvulas, filtros y sistemas de boquilla-receptáculo, que están equipados con dispositivos de sellado de gas hidrógeno. Los sistemas de distribución de hidrógeno en las HRS deben soportar presiones sustancialmente más altas, que pueden acercarse a los 90 MPa. (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara, & Nishimura, 2022),

**Marco Teórico**

**Modelado de Dinámica Molecular (MD)**

Se construyen una cadena simple de PE con 500 grados de polimerización (es decir, C 1000 H 2002) y una molécula de H 2 utilizando el modelo de todos los átomos con alta precisión. Luego, las estructuras de la cadena simple de PE y la molécula de H 2 se optimizan con 500 pasos (Zheng, y otros, 2022).

 Fujiwara et al. desarrollaron un método de permeabilidad al hidrógeno a alta presión (HPHP) [[[31]](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X#bib31),[[32]](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/science/article/pii/S036031992204441X#bib32)]. Diseñaron y fabricaron un dispositivo que puede medir con precisión la permeabilidad al hidrógeno de materiales poliméricos en estado estacionario utilizando el método HPHP y reportaron una permeabilidad al gas hidrógeno a alta presión de hasta 100 MPa para polietileno con diferentes cristalinidades. También midieron la permeabilidad de 6 tipos de polietileno utilizando un método de análisis [de desorción térmica](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/chemical-engineering/thermal-desorption) (TDA), que es un método de medición de estado no estacionario en el que la permeabilidad se deriva del [proceso de difusión](https://www-sciencedirect-com.consultaremota.upb.edu.co/topics/engineering/diffusion-process)cuando la muestra se expone a la presión atmosférica después de la exposición al hidrógeno a alta presión. (Kanesugi, Ohyama, Fujiwara, & Nishimura, 2022)

# Bibliografía

Kanesugi, H., Ohyama, K., Fujiwara, H., & Nishimura, S. (2022). High-pressure hydrogen permeability model for crystalline polymers. *ScienceDirect*. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.09.205

Zhao, J., Wang, X., Yang, Q., Yin, H., Zhao, B., Zhang, S., & Wu, C. (2022). Molecular dynamics simulation of H2 in amorphous polyethylene system: H2 diffusion in various PE matrices and bubbling during rapid depressurization. *ScienceDirect*. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.09.124

Zheng, D., Li, J., Liu, B., Yu, B., Yang, Y., Han, D., . . . Huang, Z. (2022). Molecular dynamics investigations into the hydrogen permeation mechanism of polyethylene pipeline material. *ScienceDirect*. doi:https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120773.