



### **MceMss08-003**

#### **Investigação da relação entre porosidade e propriedades elásticas em amostras de sílica por dinâmica molecular reativa**

Lucena, S.(1); Sydriao, V.(1); De Oliveira, J.A.(1);  
(1) UFC;

Usualmente, são utilizadas relações fenomenológicas para descrever a variação das propriedades mecânicas das rochas com a porosidade. Estas relações são úteis porque nem sempre ensaios experimentais em plugs de testemunhos estão disponíveis. A divergência existente nos valores de propriedades previstos pelas equações fenomenológicas para uma espécie particular de rocha vem da grande heterogeneidade como tamanho de grãos, cimentação, presença de argilominerais, etc. Se pudéssemos isolar a contribuição de cada um destes elementos para a propriedade mecânica, poderíamos diminuir as incertezas na estimativa das propriedades mecânicas. A simulação molecular oferece um método para separar variáveis do sistema e investigar a sua influência individual. Neste estudo, isolamos o elemento porosidade, e verificamos como um volume poroso atômico pode reproduzir a mesma tendência macroscópica observada no material real. Para isso, elaboramos um modelo de sílica amorfa, como primeira aproximação ao arenito, e validamos o campo de força e o método de criação da fase de sílica. Em seguida, aplicamos dinâmica molecular reativa na avaliação das propriedades elásticas, em caixas de simulação com diferentes porosidades. Além disso, usamos um parâmetro de sistema baseado no número de ligações entre os diferentes grãos da caixa de simulação, relacionando-o com os valores de porosidade e com as equações de potência fenomenológicas dos materiais reais. O campo de força reativo foi capaz de reproduzir dados experimentais de módulo de Young, distribuição radial e variação da propriedade mecânica do material com a temperatura. Demonstramos também que os dados simulados de módulo de Young versus porosidade, mediados pelo parâmetro de sistema do número de ligações, seguem a mesma lei de potência fenomenológica usada nos materiais reais.