



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
Título	Análise do Efeito Mecanocalórico em Materiais a Partir de Simulações de Dinâmica Molecular
Autor	CAIO MIRANDA MILIANTE
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

Título: Análise do Efeito Mecanocalórico em Materiais a Partir de Simulações de Dinâmica Molecular

Autor: Caio Miranda Miliante

Orientador: Professor André Rodrigues Muniz

Instituição de Origem: DEQUI - UFRGS

A busca por novos métodos de refrigeração é necessária, uma vez que a temperatura na Terra está em constante aumento e 34% do consumo residencial de energia elétrica em 2016 foi em refrigeração. Uma nova tecnologia de refrigeração que vem sendo estudada faz utilização do efeito mecanocalórico, onde materiais apresentam variações isotérmicas de entropia (ΔS_T) e variações adiabáticas de temperatura (ΔT_S) significativas através da aplicação de tensões mecânicas. Diversos materiais já reportaram este efeito, como ligas metálicas, polímeros, sólidos iônicos e materiais multiférricos, porém a busca por novos materiais eficientes e de baixo custo tem crescido significativamente. A partir disso propomos a utilização de simulações de dinâmica molecular para auxiliar na busca de novos materiais, uma vez que esta permite mensurar o seu potencial calórico e também explicar o que ocorre durante o processo, de forma mais rápida e barata comparado a experimentos tradicionais. Através de uma análise termodinâmica e de possíveis informações obtidas das simulações, foram estabelecidos três diferentes métodos para se obter as variáveis de interesse. Com o primeiro método é possível obter diretamente (porém somente) ΔT_S das simulações; no segundo se utiliza um cálculo a partir de variações de energia e volume em relação à tensão aplicada para se obter ΔT_S e ΔS_T e no terceiro se analisa variações de volume com a temperatura em diferentes tensões aplicadas para se obter os mesmos. Os métodos foram aplicados no estudo de um material com resposta mecanocalórica conhecida (sólido superiônico Li_3N , já reportado na literatura). Observou-se que os três métodos concordaram entre si com vantagens e desvantagens quando comparados. Pode-se assim estabelecer uma plataforma para busca de novos materiais, se fazendo a utilização dos benefícios trazidos pelas simulações de dinâmica molecular.