

Efeito Elastocalórico em Nanotubos de Carbono: Uma Aproximação por Dinâmica Molecular Clássica

Tiago E. Cantuário*, Alexandre F. Fonseca

Resumo

O chamado efeito elastocalórico (ECE) consiste da variação de temperatura de um sistema quando sujeito a um estímulo mecânico externo. Esse estudo buscou investigar e descrever o ECE em nanotubos de carbono através de simulações atomísticas usando dinâmica molecular clássica. O potencial utilizado foi o AIREBO (Adaptative Intermolecular Reactive Empirical Bond Order) e uma força de natureza periódica foi aplicada às extremidades do nanotubo. Os resultados obtidos mostram que essas estruturas podem sofrer variações de temperatura de até 20 K quando incluímos as correções quânticas utilizadas por Lisenkov et al. [1]. Além disso, foi demonstrado que o ECE em nanotubos não depende da velocidade com que a deformação é realizada. Uma pequena diferença de amplitude no efeito entre os principais tipos de nanotubo, zigzag e armchair, foi observada.

Palavras-chave:

Dinâmica molecular, efeito elastocalórico, nanotubos de carbono

Introdução

Nanotubos de carbono (NTCs) são nanoestruturas conhecidas por serem fortes, flexíveis e mais resistentes que o aço [2]. Sergey Lisenkov et al. [1], usando algumas dessas propriedades, mostrou que essas estruturas apresentam uma resposta térmica devido à um estímulo mecânico maior que a maioria dos materiais sob forças relativamente moderadas. Motivados por esse estudo e na tentativa de se encontrar um método mais eficiente de refrigeração de sistemas na escala micrométrica ou nanométrica, buscamos investigar o chamado efeito elastocalórico (ECE) – uma resposta térmica da estrutura devido a uma força mecânica ou a uma pressão exercida no sistema - em nanotubos de carbono através de simulações de dinâmica molecular clássica (DMC).

Resultados e Discussão

As simulações de DMC consistiram da aplicação de uma força senoidal de amplitude 15-30 nN esticando e comprimindo o NTC. Duas frequências foram escolhidas, 8GHz e 78GHz. Sobre os NTCs, foram estudados dois do tipo *armchair* - (8,8) e (16,16) – e dois do tipo *zigzag* – (12,0) e (20,0), com comprimentos de 33 Å e 108 Å. Em todas as simulações, a temperatura testada foi 300 K.

Sobre a correção quântica usada por Lisenkov et al, como forma de aproximar a simulação do sistema real, ela consiste de multiplicar o valor da variação de temperatura observada na simulação devido à aplicação da força pela razão entre os valores computacional (obtido por nós) e experimental [3] do calor específico do material (645 J/Kg.K no caso do grafeno) à uma certa temperatura. A tabela abaixo mostra os valores obtidos pelas nossas simulações.

Tabela 1. Valores computacionais do calor específico de diferentes tipos de NTC a 300K.

Tipos de NTC	Calor Específico (J/Kg.K)
8,8	2054,92
12,0	2064,49
16,16	2038,76
20,0	2048,99

A figura 1 mostra o resultado dos primeiros testes realizados com um NTC (8,8), sem a correção quântica.

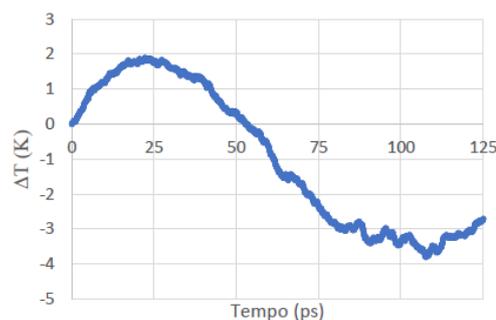


Figura 1. ECE em um NTC (8,8) à 8 GHz.

Testamos para a outra frequência e vimos que o ECE independe da velocidade com que a deformação é realizada. Além disso, usando um NTC (10,0), notamos que há uma ligeira diferença, aproximadamente 0,5 K, na amplitude do ECE entre os dois tipos de NTC.

Conclusões

Embora não tenhamos obtido os mesmos resultados numéricos que Lisenkov et al. [1], mostramos o ECE em nanotubos de carbono obtendo um valor de variação de temperatura da ordem de 20 K. Ainda assim, verificamos que o ECE obtido é maior que o da maioria dos materiais estudados e que, no caso de NTCs, o efeito não envolve temperaturas de transição de fases. Simulações futuras serão realizadas para verificar a viabilidade da refrigeração elastocalórica de um NTC dentro de um nanodispositivo.

Agradecimentos

Agradecemos a CNPq pela verba disponibilizada durante esse período de um ano para a realização desse trabalho, visando a evolução acadêmica e científica do aluno beneficiado.

Referências:

- LISENKOV, Sergey et al. Elastocaloric Effect in Carbon Nanotubes and Graphene. *Nano letters*, v. 16, n. 11, p. 7008-7012, 2016.
- https://en.wikipedia.org/wiki/Mechanical_properties_of_carbon_nanotubes. Acesso em 15/07/2018.
- HONE, J. et al. Quantized phonon spectrum of single-wall carbon nanotubes. *Science*, v. 289, n. 5485, p. 1730-1733, 2000.