



**Universidade:
presente!**

UFRGS
PROPEAQ



XXXI SIC

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

Evento	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2019
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Análise do Efeito Barocalórico em Borracha Natural através de Simulações de Dinâmica Molecular
Autor	CAIO MIRANDA MILIANTE
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

ANÁLISE DO EFEITO BAROCALÓRICO EM BORRACHA NATURAL ATRAVÉS DE SIMULAÇÕES DE DINÂMICA MOLECULAR

Aluno: Caio M. Miliante

Orientador: André R. Muniz

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil

O efeito barocalórico ocorre a partir da aplicação de pressão sobre um material, levando a um significativo aquecimento do mesmo devido a deformação sofrida no processo. Este efeito pode ser utilizado em novos sistemas eficientes de aquecimento/refrigeração, e foi observado em diferentes tipos de materiais, como nanoestruturas de carbono, eletrólitos sólidos, “cristais plásticos”, e recentemente em borracha natural (NR). Variações de temperatura acentuadas (na faixa de 20K) foram verificadas em experimentos a partir da compressão de NR na faixa de 2600-3900 atm, se mostrando superior às obtidas para alguns dos outros materiais citados, sendo a borracha um material de origem renovável e de mais baixo custo comparado aos demais. Este estudo tem como objetivo analisar o efeito barocalórico em borracha natural usando simulações de dinâmica molecular em conjunto com uma análise termodinâmica do processo, buscando investigar o que ocorre em nível molecular no processo, e compreender as causas deste efeito. As simulações foram conduzidas no software LAMMPS, e as interações interatômicas foram descritas com o potencial CHARMM, que previu propriedades físicas e mecânicas da borracha condizentes com valores experimentais. A partir de testes de compressão adiabática em ciclos foi possível observar aumentos de temperatura (ΔT) de 10-15K a partir da aplicação de pressões de 6000-10000 atm na amostra partindo da T ambiente, um pouco inferiores aos observados experimentalmente nestas condições. Determinou-se também esta variação para outras temperaturas iniciais e pressões, e verificou-se boa concordância da dependência dos valores de ΔT com a pressão com experimentos, validando a metodologia desenvolvida. Após a remoção da pressão aplicada constatou-se o retorno da borracha para a sua configuração inicial, tendo a sua temperatura inicial restabelecida, indicando então a possibilidade da utilização futura desta técnica em ciclos térmicos. Atualmente está sendo conduzida uma análise minuciosa da evolução estrutural do material e das transformações de energia envolvidas (intra- e intermolecular), para melhor compreender a origem do efeito barocalórico na borracha e as características do material que o conferem significativas variações de temperatura sob aplicação de pressão.