



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Avaliação do efeito Barocalórico em parafinas usando Dinâmica Molecular
Autor	CAIO MIRANDA MILIANTE
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

Avaliação do efeito Barocalórico em parafinas usando Dinâmica Molecular

Autor: Caio Miranda Miliante

Orientador: Professor Dr. André Rodrigues Muniz

Instituição: DEQUI - UFRGS

O mais recente relatório mundial de mudanças climáticas demonstrou que os eventos climáticos extremos observados atualmente decorrem diretamente da atuação humana. Para suportar estas ondas de calor e frio severas, o consumo energético residencial e comercial com sistemas de refrigeração naturalmente aumenta, portanto é necessário buscar novas tecnologias mais eficientes e sustentáveis. Uma dessas alternativas é a refrigeração em estado sólido explorando o efeito barocalórico, na qual se obtém variações isotérmicas de entropia (ΔS_T) e variações adiabáticas de temperatura (ΔT_S) significativas em materiais a partir da aplicação de pressão isostática. Apresentamos em um trabalho anterior uma metodologia a qual possibilita aferir este efeito a partir de simulações de dinâmica molecular e, assim, avaliar a resposta de novos materiais sem a necessidade de testes experimentais. No presente estudo utilizamos desta para avaliar o efeito em parafinas (alcanos de cadeia longa), promissores devido à resultados positivos anteriores com polímeros. Foram avaliados alcanos não ramificados com diferentes tamanhos de cadeia (contendo 12 a 32 carbonos), submetidos à compressões isotérmicas. Os resultados mostraram que os alcanos apresentam um efeito barocalórico comparável a outros materiais considerados atualmente como estado da arte, como os cristais plásticos, e melhor do que o reportado para polímeros elastoméricos e ligas metálicas. Foi possível avaliar a diminuição do efeito com o aumento do tamanho da cadeia do hidrocarboneto, sendo observada uma ΔS_T de ~ 187 J/kgK e ΔT_S de $\sim 30,5$ K para o dodecano (C12), quando parte-se de uma temperatura de 343K. As simulações mostram que variações significativas na energia de interação entre as longas cadeias induzidas pelo confinamento sob pressão são responsáveis por esse alto efeito. Este estudo abre as portas para a utilização destes no desenvolvimento de novos sistemas de refrigeração em estado sólido e sugere que outras substâncias de composição similar possam ser possíveis candidatos à mesma aplicação.