



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Cálculo da condutividade térmica de nanofilamentos de carbono por simulações de dinâmica molecular
Autor	KATIANNA HUGUE
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

Cálculo da condutividade térmica de nanofilamentos de carbono por simulações de dinâmica molecular

Aluna: Katianna Hugue

Orientador: André Rodrigues Muniz

Instituição de Origem: UFRGS

Nanofilamentos de carbono são materiais unidimensionais cujas propriedades térmicas apresentam alta variabilidade de acordo com sua morfologia e comprimento. Há interesse nas propriedades de nanofilamentos sintetizados a partir de moléculas aromáticas policíclicas ou contendo heteroátomos, principalmente para o ajuste de características mecânicas e térmicas de nanocompósitos. Usando simulações de dinâmica molecular, nosso objetivo é avaliar diferentes métodos para o cálculo da condutividade térmica (K) de nanofilamentos de carbono variados, usando o software LAMMPS. Para fins de teste, foi usado o CNT(3,0) - nanofilamento formado pelo empilhamento simples de moléculas de benzeno, cujas propriedades já foram estudadas na literatura. Nesse sentido, dois métodos foram explorados: o primeiro, que utiliza termostatos de Langevin para fixar temperaturas em diferentes regiões do sistema; e o segundo, que estabelece trocas de energia entre regiões específicas do sistema através do método de Muller-Plathe. Ambas fornecem como resultado o fluxo de calor no sistema e o perfil de temperaturas estabelecido, através dos quais é possível calcular a condutividade térmica pela Lei de Fourier. No método de Langevin há uma maior quantidade de parâmetros que precisam ser ajustados, e pequenas mudanças nestes causaram alta variabilidade nos K encontrados. No método de Muller-Plathe, os valores calculados para K foram bastante próximos aos obtidos em pesquisas anteriores, com variações menores em relação à alteração de parâmetros. A partir dos resultados iniciais podemos inferir que o método de Muller-Plathe é mais adequado para o cálculo da condutividade térmica de nanofilamentos de carbono, devido à menor variabilidade de K com a alteração de parâmetros. Nos próximos trabalhos devemos calcular as propriedades térmicas de outros nanofilamentos de carbono de composição e morfologia variada, visando sua aplicação na melhoria da condutividade térmica de nanocompósitos.