

## 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

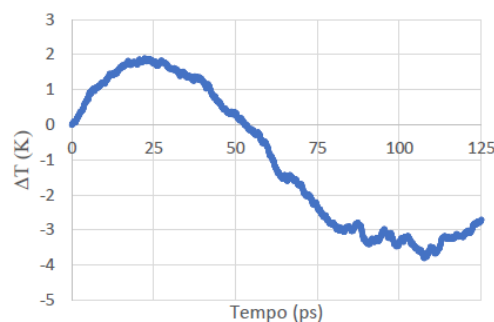
As simulações de DMC consistiram da aplicação de uma força senoidal de amplitude 15-30 nN esticando e comprimindo o NTC. Duas frequências foram escolhidas, 8GHz e 78GHz. Sobre os NTCs, foram estudados dois do tipo *armchair* - (8,8) e (16,16) – e dois do tipo *zigzag* – (12,0) e (20,0), com comprimentos 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](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.