

SESSÃO DE QUÍMICA, FÍSICA E MATEMÁTICA

CONDUÇÃO TÉRMICA EM REGIME LOCAL DE CAMPO-PRÓXIMO**CONDUÇÃO TÉRMICA EM SISTEMAS NANOESTRUTURADOS****Rodrigo Wenceslao Apaza Choquehuanca**

Estudante do curso de graduação em Engenharia de Energias Renováveis

Bolsista Pibic - UNILA

rodrigo.choquehuanca@aluno.unila.edu.br

Luciano Lapas

Professor Adjunto

Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza

Orientador

luciano.lapas@unila.edu.br

Resumo: A busca por fontes limpas de energia sem impacto climático e ambiental constitui um grande objetivo estratégico. Neste trabalho desenvolvemos um estudo sobre a conversão de energia em escala da ordem de alguns nanômetros pela transferência de calor entre clusters em regime de campo-próximo. Por meio de Simulação de Dinâmica Molecular (SDM), estudamos o comportamento da transferência de calor entre duas nanopartículas (NPs). Implementamos por meio de SDM a interação entre duas NPs para o caso 2D. A partir da termodinâmica de não-equilíbrio aplicada a sistemas mesoscópicos, desenvolvemos uma análise de troca de calor entre dois clusters, controlando a distância de separação entre eles. Utilizamos o método de Verlet, baseado no método de diferenças finitas (MDF), e o potencial de Buckingham para descrever as forças atrativas e repulsivas experimentadas pelos átomos. A técnica permite uma estimativa da variação da temperatura com o transcurso do tempo, como resultado da interação entre os clusters. Calculamos ainda a condutividade térmica entre os dois clusters para diferentes distâncias de separação entre eles. Com efeito, a distância de troca máxima de energia pode ser estimada. Para o caso de distâncias de separação menores do que alguns nanômetros o método adotado não é adequado para fornecer informações confiáveis. Para realizar essa abordagem, foi necessário um estudo detalhado das condições iniciais e de contorno.

Palavras-chave : Simulação de Dinâmica Molecular (SDM), Energia, Cluster, Condutividade Térmica.