

EXATAS E DA TERRA

SIMULAÇÃO DE TRANSPORTE DE CALOR ENTRE MATERIAIS NANOESTRUTURADOS

WENTZ, Victor Hugo.

Engenharia Física - ILCVN- UNILA
E-mail: victor.wentz@aluno.unila.edu.br

LAPAS, Luciano Calheiros.

Engenharia Física - ILCVN - UNILA
E-mail: luciano.lapas@unila.edu.br

1 Introdução

O uso de nanopartículas nas tecnologia atuais vem crescendo muito com o avanço nos estudos, como, p.ex., no uso das mesmas para o aumento da eficiência energética em uma células solares.

O objetivo deste trabalho é fazer a implementação a partir de cálculo numérico que compute a transferência de energia entre duas nanopartículas e a interação entre elas. Essa interação se da pela equação abaixo.

$$m \frac{dv}{dt} = -m\gamma v + f + \frac{dU(r)}{dr} \quad \text{eq.1}$$

onde utilizamos o potencial de Lennard-Jones.

2 Metodologia

Para a realização do projeto foi criado um modelo que consistia na criação de 2 cubos de mesmo tamanho, submetidos a diferentes temperaturas e separados por uma distância arbitrária. Em cada cubo coloca-se uma partículas em posições definidas e, a partir da dinâmica de interações, são analisadas as transferências de energia entre elas. O cubo da esquerda é mantido a uma temperatura de 300 K e o cubo da direita a uma temperatura de 150 K. O método utilizado para estudo da velocidade e posição é por meio do método de Euler.

Para a implementação do simulador foi utilizado a linguagem de programação Python. O simulador é dividido em várias funções: função para força aleatória, força de Lennard-Jones e depois essas funções são chamadas dentro da função que calcula a trajetória e velocidade das partículas.

3 Fundamentação teórica

A transferência de calor ocorre quando 2 corpos submetidos a diferentes temperaturas entram em contato ou estão em um mesmo local, próximos um do outro, fazendo com que a energia térmica de um corpo seja transferido para outro. Em nanoescala esse processo não é tão simples, ele sofre influência de várias forças. Na Eq. (1). temos a força de Lennard-Jones.

$$f_{ij} = \left(48 \frac{\epsilon}{\sigma_{ij}}\right) \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{14} - 0.5 \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^8\right]$$

E também temos uma força aleatória cujo módulo é estabelecido em $\sqrt{2m\gamma KT}$, onde K é a constante de Boltzmann.

Utilizando o método de Euler se faz uma aproximação da trajetória e da velocidade das partículas, obtendo a potência transferida entre as nanopartículas. Quando se obtém as potências de cada nanopartícula, podemos obter a energia transferida entre elas.

4 Resultados

Após a execução das interações, obtivemos os resultados numéricos para a velocidade e a posição utilizando o método de Euler. São observados os comportamentos esperados em experimentos recentemente realizados, verificado a ênfase à transferência de radiação térmica entre as estruturas.

5 Conclusão

Os resultados estão de acordo com os resultados esperados para este projeto, possibilitando a implementação computacional de resultados experimentais de grande utilidade para a área.

6 Referências

12.

- [1] Pérez-Madrid, A. and Rubí, J. M. and Lapas, L. C. Phys. Rev. Lett. 103, 048301(2009).
- [2] A. Pérez-Madrid and L. C. Lapas and J. M. Rubí. PLOS One 8, e58770 (2013).
- [3] Rousseau, E. and Siria, A. and Jourdan, G. and Volz, S. and Comin, F. and Chevrier, J. and Greffet, J.-J. Nature Photon. 3, 514 (2009)