



**Universidade:
presente!**

UFRGS
PROPEAQ

XXXI SIC

Salão UFRGS 2019
CONHECIMENTO FORMACÃO INOVAÇÃO

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

Evento	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2019
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Estudo computacional das propriedades mecânicas e eletrônicas de nanofilamentos de carbono parcialmente saturados
Autor	PEDRO GUERRA DEMINGOS
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

Estudo computacional das propriedades mecânicas e eletrônicas de nanofilamentos de carbono parcialmente saturados

Aluno: Pedro Guerra Demingos

Orientador: André R. Muniz

Departamento de Engenharia Química, UFRGS

Nanofilamentos de carbono (NCs, *carbon nanothreads*) são materiais unidimensionais sintetizados pela primeira vez em 2015, a partir da aplicação de altas pressões a cristais de benzeno. A maior parte dos átomos de carbono presentes nos NCs possuem hibridização sp^3 , mas estudos experimentais recentes mostram quantidades consideráveis de ligações duplas C=C. Adicionalmente, em 2018 foi realizada uma síntese similar utilizando piridina, o que resultou na inserção de átomos de nitrogênio na estrutura dos NCs. Estudos computacionais anteriores mostraram que NCs completamente saturados apresentam excelentes propriedades mecânicas, comparáveis às de outras nanoestruturas de carbono. Entretanto, os novos resultados experimentais apontam detalhes na estrutura dos NCs (presença de ligações C=C e C=N) cujos efeitos nas propriedades ainda não são conhecidos. Logo, o presente trabalho se propôs a utilizar cálculos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para elucidar como essas alterações estruturais afetam as propriedades mecânicas e eletrônicas dos NCs. Os resultados mostram que as estruturas totalmente saturadas são as mais estáveis, e que ligações duplas C=N aumentam consideravelmente a estabilidade das estruturas parcialmente saturadas. NCs com átomos hibridizados em sp^2 são menos resistentes e rígidos do que seus equivalentes saturados por apresentar um menor número de ligações por seção transversal, mas ainda assim possuem ótimas características mecânicas, como tensões unidimensionais de fratura da ordem de 7,0 nN. A presença de ligações duplas alternadas leva a estruturas corrugadas, capazes de atingir altos valores de deformação antes da fratura. O comportamento eletrônico dos NCs parcialmente saturados varia entre semicondutor (*gap* de energia mínimo de 1,8 eV segundo o funcional GGA/PBE) e isolante (máximo de 4,0 eV), diferindo das estruturas totalmente saturadas (todos os *gaps* de energia acima de 4,0 eV). Átomos de nitrogênio diminuem o *gap* de energia quando apresentam hibridização sp^3 , devido à inserção de níveis intermediários de energia, verificados por meio de cálculos de densidade de estados eletrônicos (DOS). Os nitrogênios hibridizados em sp^2 , por sua vez, aumentam o *gap* devido à maior localização de carga gerada pela polaridade da ligação dupla C=N. Esses resultados mostram que os NCs parcialmente saturados podem ser utilizados para as aplicações anteriormente propostas para as estruturas totalmente saturadas, como nanofibras e reforço de nanocompósitos, uma vez que também apresentam excelentes propriedades mecânicas. Adicionalmente, a elucidação das propriedades eletrônicas permite uma nova gama de usos aos materiais semicondutores, como em nanoeletrônica.