

Estimação das Propriedades Mecânicas de Nanomalhas de Grafeno

Augusto M. Christmann¹, André R. Muniz²

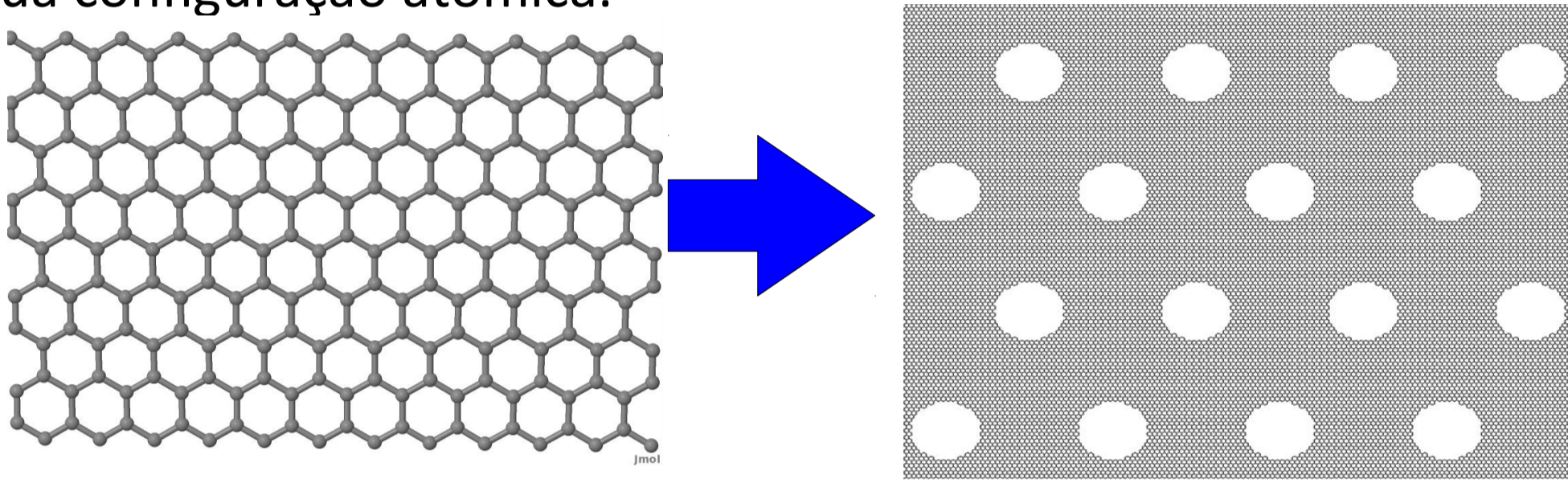
1 augustoc@enq.ufrgs.br
2 amuniz@enq.ufrgs.br



ENG - Engenharias

Introdução

- Nanomalhas de grafeno são estruturas derivadas do grafeno obtidas a partir da inserção de defeitos ('buracos') periódicos em sua configuração atômica.



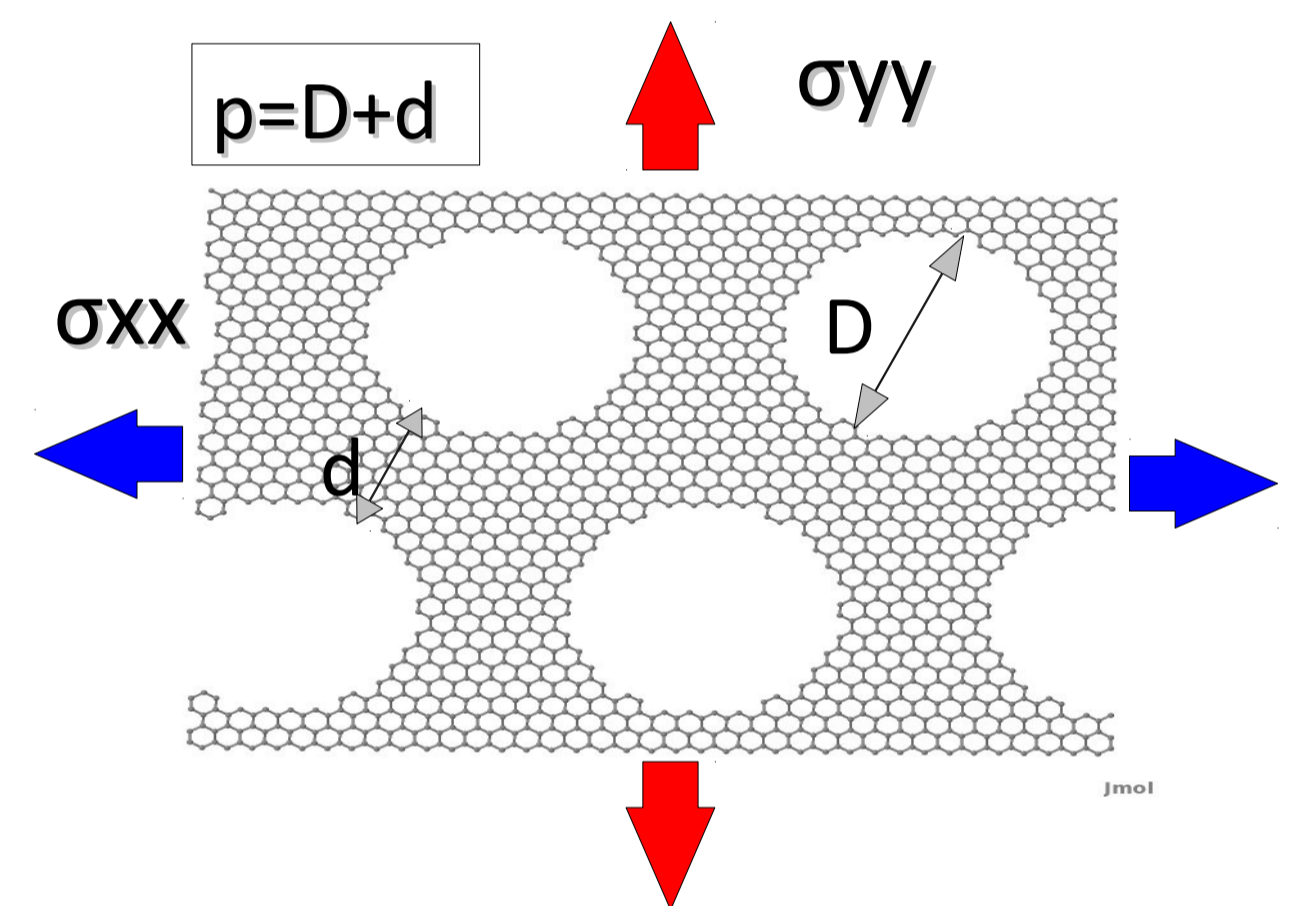
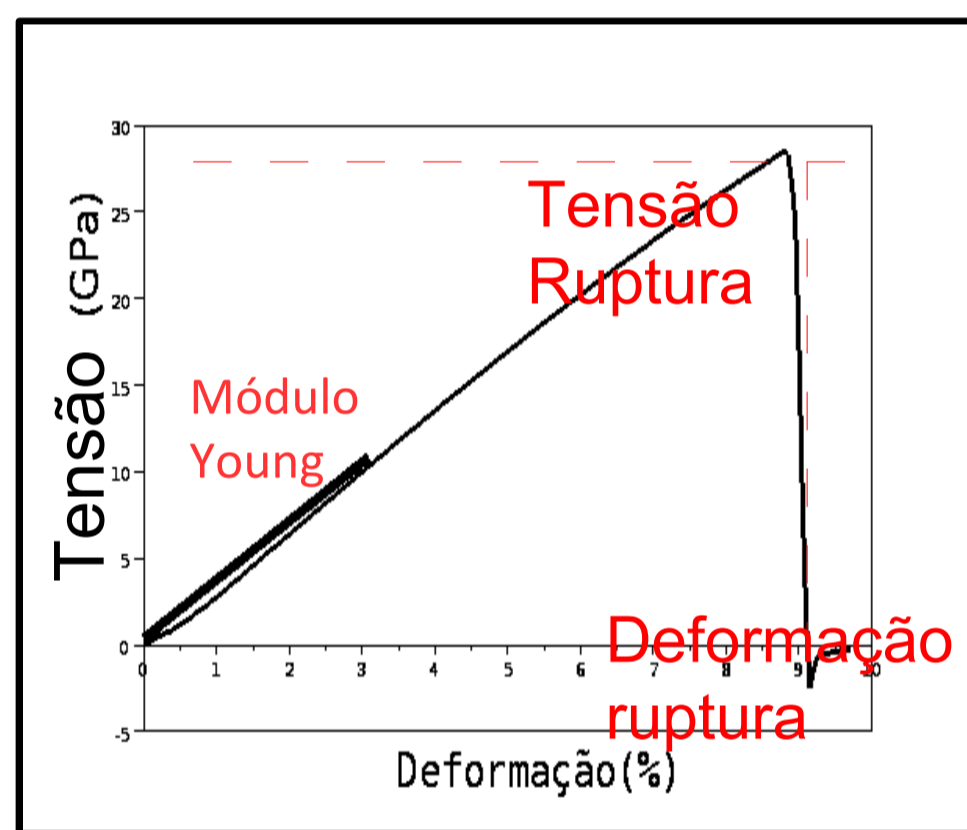
Objetivo

- Calcular as mudanças que ocorrem nas propriedades mecânicas do material com a introdução de defeitos circulares de diferentes diâmetros (D) e com diferentes periodicidades (p), através da simulação atômica de testes de tração uniaxial.

- Aplicações:
 - Nanoeletrônica: transformação de grafeno(semimetal) em semiconductor, com fino controle do bandgap.
 - Separação/purificação de misturas.

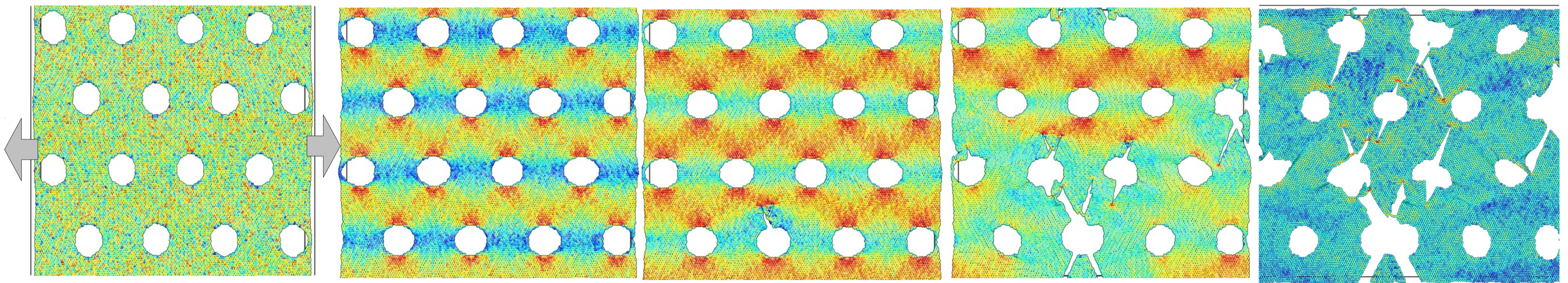
Metodologia

- Simulações de dinâmica molecular do teste de deformação uniaxial;
- Utilização do software de código aberto – LAMMPS;
- Potencial interatômico usado foi o AIREBO
- Deformação uniaxial aplicada até o ponto de ruptura do material, sob taxa de deformação (10^{-4} ps⁻¹) e temperatura (300K) constantes.
- São obtidos dados da tensão total na estrutura a cada passo de tempo, obtendo-se assim curvas de tensão-deformação, de onde são obtidos diretamente a tensão e a deformação de ruptura e o módulo de Young.
- Usou-se dois tamanhos de caixa de simulação : 165x145Å (9248 átomos) e 334x288Å (36992 átomos), com diferentes densidades de defeitos.



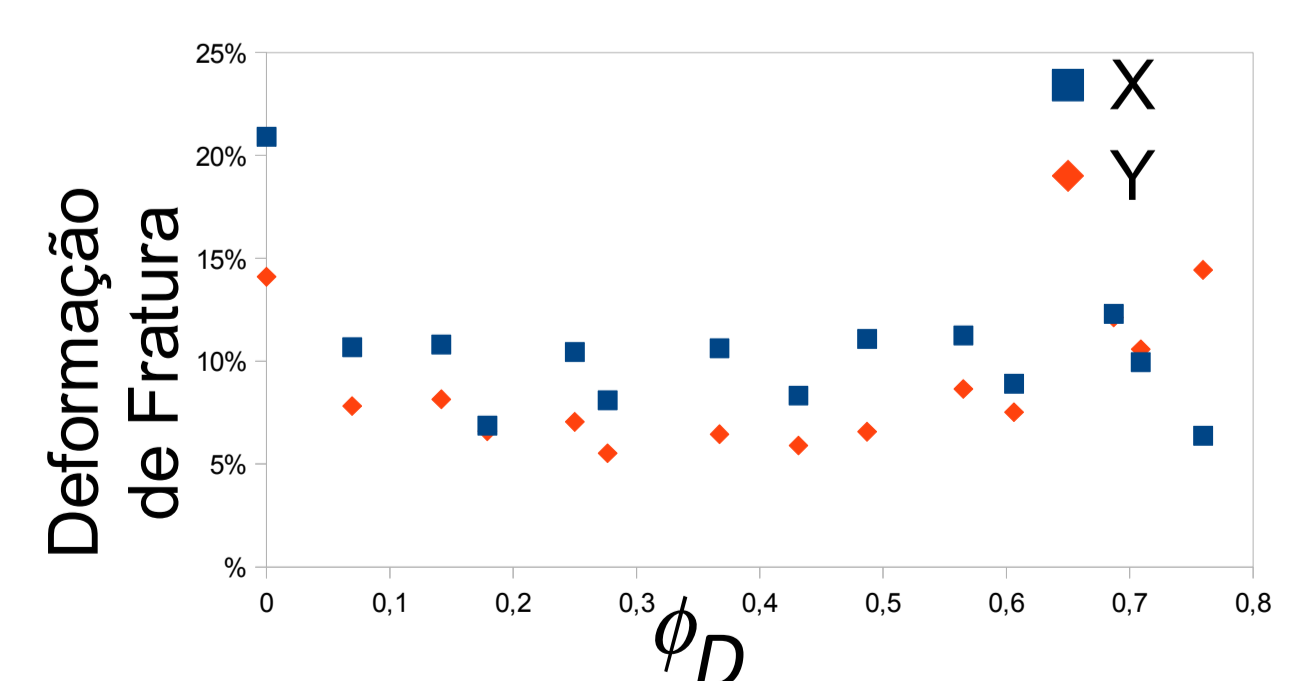
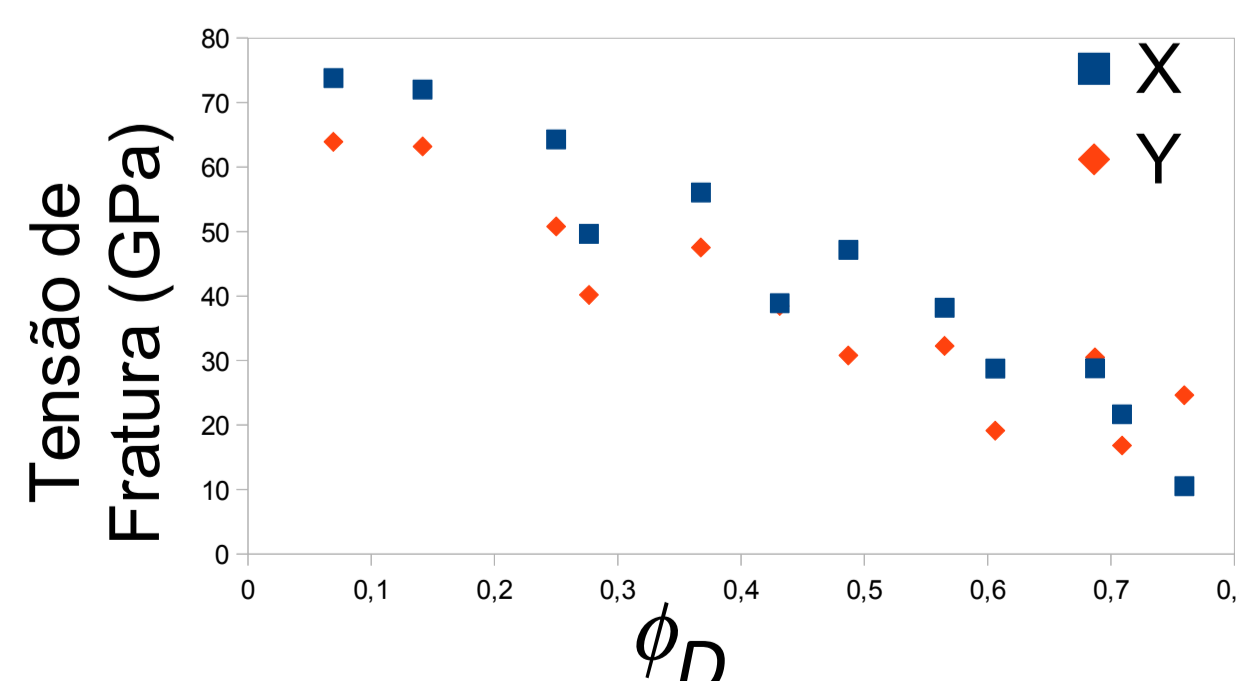
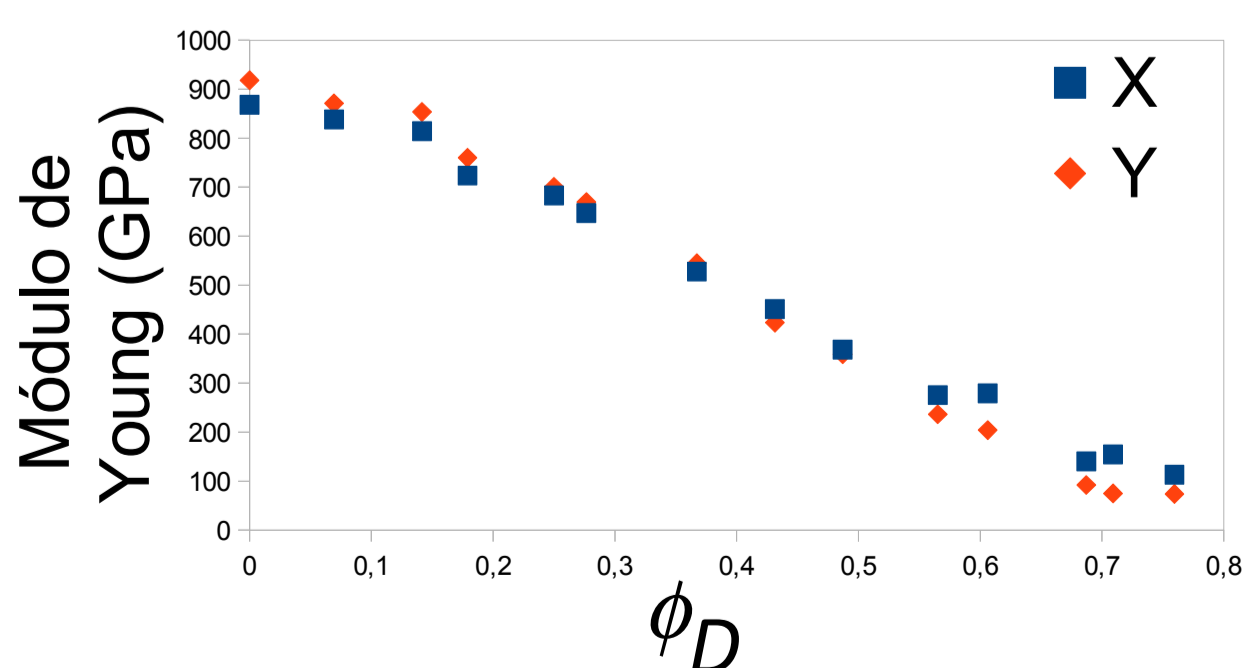
Resultados

- Distribuição de tensões concentradas em regiões específicas da estrutura, nas quais se inicia a ruptura do material; fratura se propaga ao longo das linhas de tensão elevada.



- Com o aumento do tamanho dos defeitos observa-se um decréscimo monotônico na tensão de ruptura e do módulo de Young; a deformação de ruptura decresce e se mantém constante após $\phi_D \sim 0.10$.

- Dependência linear das propriedades mecânicas em função do parâmetro adimensional $\phi_D = D/p$ para uma grande faixa de valores e diferentes tamanhos de caixas de simulação.



Considerações Finais

Simulações de dinâmica molecular mostram-se adequadas ao estudo das propriedades mecânicas de nanomalhas de grafeno. Os resultados mostram que há variações nas propriedades ao longo das duas direções (x e y) e que sua dependência com a densidade de defeitos é praticamente linear na faixa estudada. Os resultados foram independentes do tamanho da caixa de simulação, e na forma adimensional, podem ser extrapolados para nanomalhas de diferentes dimensões conforme observado em experimentos.

