

Fulerenos Porosos

Fulerenos porosos foram idealizados a partir da estrutura do grafeno poroso (R Paupitz, et al, *Physical Chemistry Chemical Physics* 16 (46), 25515, 2014), compostos por carbono e hidrogênio. Estas estruturas podem ser usadas como bloco fundamental na criação de nanoestruturas porosas 3D baseadas em carbono.

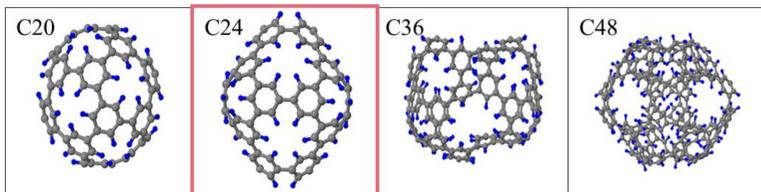


Figura 1. Exemplos de estruturas de fulerenos porosos (R Paupitz, et al, *Physical Chemistry Chemical Physics* 16 (46), 25515, 2014), contendo diferentes números de átomos e forma geométrica. Átomos de carbono em cinza e de hidrogênio em azul.

Nanoestruturas Porosas

Materiais nanoporosos encontram aplicações em diferentes áreas, como no armazenamento de gases, absorção de contaminantes, suportes para catalisadores, entre outros. A busca de nanoestruturas porosas com alta estabilidade mecânica e propriedades versáteis é de grande interesse prático.

Foram propostas uma série de estruturas geradas a partir da coalescência de fulerenos porosos, inicialmente utilizamos o fullereno C₂₄. Exemplos de estruturas geradas são mostradas abaixo.

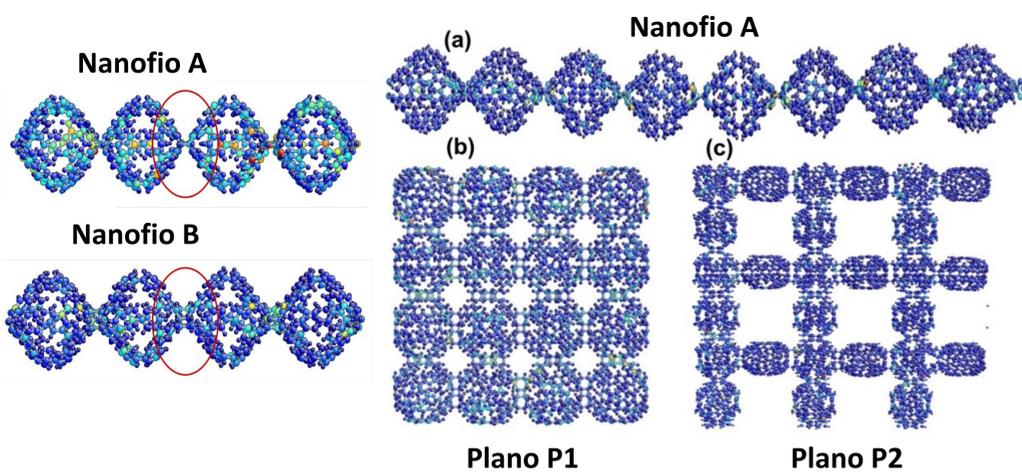


Figura 2. Exemplos de estruturas geradas pela coalescência de fulerenos C₂₄. Em (a) tem-se uma estrutura unidimensional, equivalente a um nanofio, e em (b) e (c) duas estruturas planares, arranjadas em um *lattice* quadrado e de tal forma que poros de diferentes dimensões estejam presentes.

Metodologia

Simulações de dinâmica molecular clássica empregando o potencial interatômico ReaxFF (A.C.T van Duin et al., *Journal of Physical Chemistry A*, 105, 9396, 2001) foram usadas para analisar a estabilidade de estruturas formadas pela coalescência de diversos fulerenos e para determinar as propriedades mecânicas do material resultante. Testes de tração uniaxial foram conduzidos para obter as curvas de tensão-deformação e tensão e deformação de ruptura. As simulações foram conduzidas no software LAMMPS.

Resultados - Testes de Tração Uniaxial

Após a etapa de relaxação estrutural, aplicamos testes de tração uniaxial nas estruturas propostas. Para os planos foram aplicados testes nas duas direções possíveis.

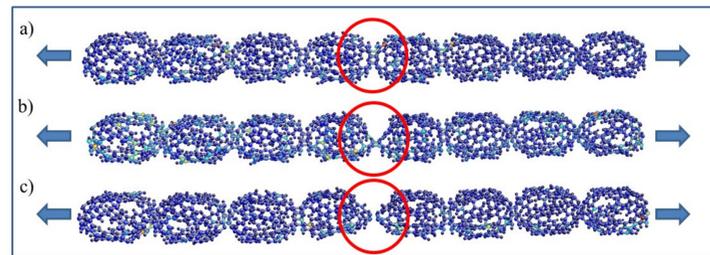


Figura 3. Configurações atômicas do nanofio durante o processo de deformação axial. As setas indicam a direção na qual o material está sendo deformado. A região circulada em vermelho mostra onde a fratura ocorre.

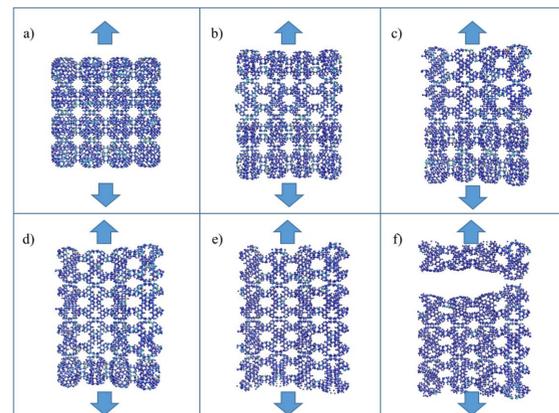


Figura 4. Configurações atômicas do plano sem poros maiores (P1) durante o processo de deformação axial. As setas indicam a direção na qual o material está sendo deformado.

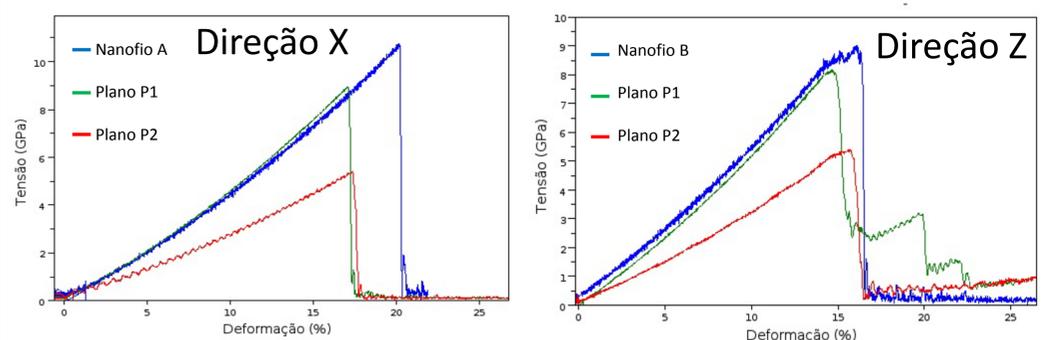


Figura 5. Curvas de Tensão-Deformação para as estruturas estudadas. O ponto de fratura é indicado pela queda abrupta da tensão.

As estruturas porosas apresentam comportamento anisotrópico, sendo mais resistentes na direção Z. Curvas de tensão-deformação referentes aos testes conduzidos nas direções X e Z, respectivamente, são mostradas acima.

Nota-se que as mesmas apresentam comportamento frágil, e uma tensão e ruptura na faixa de 2-15 GPa, inferior a nanoestruturas de carbono (90-120 GPa para grafeno e nanotubos de carbono), mas superior a materiais convencionais como aço e ligas metálicas (< 1 GPa).

Conclusões

Verificou-se que as estruturas propostas têm boa estabilidade térmica e alta resistência mecânica, apresentando potencial de aplicação no desenvolvimento de tecnologias sustentáveis, em processos de adsorção e separação de gases.