



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2018
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Análise das Propriedades Estruturais de C-Dots via Simulações de Dinâmica Molecular
<b>Autor</b>	MATHEUS TEIXEIRA NOVÔA
<b>Orientador</b>	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

# Análise das Propriedades Estruturais de C-Dots via Simulações de Dinâmica Molecular

Autor: Matheus Teixeira Novôa

Orientador: André Rodrigues Muniz

Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

Departamento de Engenharia Química

*Carbon Quantum Dots*, ou simplesmente C-dots, são nanopartículas quase esféricas constituídas predominantemente por fragmentos de grafeno empilhados, os quais podem ser de tamanhos variados, e também possuem grupos funcionais agregados à sua estrutura. Estas possuem propriedades notáveis, tais como, luminescência e biocompatibilidade, que as conferem grande aplicabilidade em bioimagem, sensores e medicina. Estas propriedades dependem fortemente de detalhes da sua estrutura, como por exemplo, quais grupos funcionais estão presentes (hidroxilas, ácidos carboxílicos, aminas, amidas, etc.), e como estes estão dispostos ao longo do material. Estes detalhes estruturais e sua relação com as propriedades ainda não são perfeitamente entendidos, o que é de suma importância para o desenvolvimento de métodos de síntese com maior controle das propriedades finais. Esse trabalho é a continuação de um estudo anterior do nosso grupo de pesquisa, que busca usar simulações de dinâmica molecular (MD) para propor variadas estruturas realísticas para C-dots, baseado em observações experimentais. Neste presente trabalho, foram propostas diversas estruturas de C-dots passivados com grupos funcionais nitrogenados e oxigenados, com diferentes arranjos ao longo da superfície e no interior dos nanoflakes. Os grupos funcionais analisados estão de acordo com os observados em trabalhos experimentais da literatura. Com estas estruturas, será possível conduzir futuros estudos que permitam estabelecer uma relação precisa entre características estruturais e propriedades apresentadas, visto que modelos estruturais muito simplificados vem sendo usados atualmente. Os métodos usados para analisar a estabilidade das estruturas propostas consistem em duas frentes. Uma se baseia no cálculo da energia de adesão entre as camadas dos C-dots, por meio de simulações MD de relaxação estrutural em baixa temperatura, utilizando o potencial interatômico ReaxFF. A outra consiste na observação da estabilidade da nanopartícula em simulações MD conduzidas sob alta temperatura. Os resultados do estudo apontam, quanto aos cálculos de energia de adesão, que C-dots passivados com grupos funcionais nitrogenados possuem uma energia de adesão maior em relação aos passivados com grupos oxigenados, indicando uma maior estabilidade dos primeiros. Quanto aos testes de estabilidade térmica, foi observado que os C-dots avaliados são capazes de manter suas camadas ordenadas até uma temperatura de, em média, 1000 K, sendo observado após essa temperatura, o desprendimento das camadas mais externas. Estes testes, juntamente com uma análise detalhada da composição das estruturas e comparação com dados experimentais, demonstram que as estruturas propostas são capazes de representar adequadamente as características de C-dots obtidos em diferentes processos de síntese.