



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Propriedades mecânicas de nanofilamentos de carbono funcionalizados
Autor	SUELEN LAÍS DE SOUZA CARDOSO
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

PROPRIEDADES MECÂNICAS DE NANOFILAMENTOS DE CARBONO FUNCIONALIZADOS

Suelen Laís de Souza Cardoso (IC), André Rodrigues Muniz (PQ)
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Nanofilamentos de carbono (C-NTs) correspondem à uma classe específica de nanoestruturas de carbono unidimensionais, sintetizadas através da compressão do benzeno cristalino em uma reação de estado sólido. C-NTs caracterizam-se por uma estrutura ultrafina formada por carbono sp^3 , superfície totalmente hidrogenada e a possibilidade de saturação completa ou parcial. Estes nanofilamentos apresentam alta resistência mecânica, e são promissores para o desenvolvimento de novas tecnologias. Estudos recentes realizados com C-NTs totalmente saturados e funcionalizados demonstraram que a presença de grupos funcionais variados não altera significativamente as propriedades mecânicas. Este estudo visa analisar como as propriedades mecânicas de C-NTs parcialmente saturados comportam-se frente à adição de grupos funcionais na sua superfície, através de reações de diferentes substâncias com as insaturações presentes. A metodologia envolve a criação de diferentes estruturas de C-NTs funcionalizados e aplicação de testes de deformação mecânica uniaxial, empregando simulações de dinâmica molecular clássica. Partiram-se de três tipos de configurações parcialmente saturadas de C-NTs conhecidas como *syn*, *anti* e *syn-anti*. Essas configurações possuem diferenças no alinhamento relativo entre as ligações duplas C=C ao longo da cadeia. Dessa forma, adicionaram-se grupos OH⁻ em variadas quantidades e distribuições espaciais nas ligações duplas remanescentes no material (análogo à uma reação de hidratação). Os resultados demonstraram que as propriedades são levemente alteradas, e que alguns C-NTs funcionalizados apresentam uma maior tensão e deformação de ruptura quando comparados aos C-NTs sem adição de grupos funcionais, especialmente o isômero *anti* com todas as duplas funcionalizadas e o *syn-anti*. Uma possível explicação para este efeito é a formação de pontes de hidrogênio ao longo da estrutura. A fim de validar esta hipótese, testes com outros grupos funcionais serão realizados. Caso validada e o processo de funcionalização seja considerado viável, estes C-NTs funcionalizados poderão ser aplicados na produção de nanocompósitos reforçados e em novas tecnologias em nanoescala.