



**REENCONTROS  
NOVOS ESPAÇOS  
OPORTUNIDADES**

**XXXIV SIC** Salão Iniciação Científica

**26 - 30  
SETEMBRO  
CAMPUS CENTRO**

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2022
<b>Local</b>	Campus Centro - UFRGS
<b>Título</b>	Avaliação de propriedades mecânicas de nanofilamentos de carbono funcionalizados através de simulações de dinâmica molecular
<b>Autor</b>	KATIANNA HUGUE
<b>Orientador</b>	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

Nanofilamentos de carbono são materiais unidimensionais formados por átomos de carbono hibridizados em  $sp^3$  (como no diamante), cujas propriedades mecânicas são apropriadas para uso em nanocompósitos. Para este fim, o uso de nanofilamentos funcionalizados é fundamental, já que eles apresentam melhor interação com polímeros polares, gerando assim um nanocompósito com boa integração entre fases. Usando simulações de dinâmica molecular no software LAMMPS, avaliamos as propriedades mecânicas de nanofilamentos funcionalizados com grupos hidroxila em diferentes graus de funcionalização, que podem ser formados através de reações de hidratação nas ligações insaturadas do nanofilamento original. Através de curvas de tensão por deformação, foi possível estimar a influência da presença destes grupos funcionais na resistência dos materiais propostos. A tensão de ruptura dos nanofilamentos com até 50% de funcionalização, apresenta poucas mudanças em relação à sua versão não funcionalizada em temperatura ambiente. Observa-se uma leve queda das tensões e deformações de ruptura. Foram obtidos bons resultados para estruturas com 100% de funcionalização a baixa temperatura, sendo que algumas estruturas apresentaram uma melhora de suas propriedades mecânicas em relação às estruturas originais. Porém, elas se tornaram pouco resistentes a temperaturas mais altas. A partir dos resultados iniciais podemos inferir que a funcionalização parcial de nanofilamentos gera estruturas estáveis com boas propriedades mecânicas. As próximas etapas neste trabalho envolvem simulações dos nanofilamentos avaliados inseridos em nanocompósitos, além de testes com nanofilamentos híbridos que apresentem variação no grau de funcionalização ao longo do comprimento da molécula, de modo a melhor representar os resultados da reação de hidratação.