



Evento	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2013
Local	Porto Alegre - RS
Título	Análise Computacional das Propriedades Mecânicas de Nanopeneiras de Grafeno
Autor	AUGUSTO MOHR CHRISTMANN
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

O grafeno é um nanomaterial baseado em carbono amplamente estudado, devido à suas extraordinárias propriedades mecânicas e eletrônicas, possuindo um grande potencial de aplicação tecnológica. Para aplicações em eletrônica, é necessário torná-lo um semicondutor; uma das formas de se fazê-lo é introduzindo imperfeições em sua estrutura, funcionalizando sua superfície, ou removendo alguns átomos de carbono. Neste último caso, são obtidas as nanopeneiras de grafeno (*graphene nanomeshes*), lâminas que contém 'buracos' ao longo de sua estrutura. Recentes estudos mostram que este processo viabiliza o fino controle das propriedades eletrônicas do grafeno; entretanto pouco se sabe sobre o efeito nas propriedades mecânicas deste. Desta forma o objetivo desta pesquisa é avaliar o impacto destas mudanças nas propriedades mecânicas deste material através de uma análise computacional. Simulações de dinâmica molecular sob temperatura e taxa de deformação uniaxial constantes são usadas para estimar o módulo de elasticidade e a tensão e deformação de ruptura, em função do tamanho e geometria dos buracos inseridos e da distância entres estes. Os resultados encontrados até o momento mostram que há um decréscimo em sua resistência mecânica, porém se mantendo na mesma ordem de magnitude em relação ao material original. Espera-se que os resultados deste trabalho sirvam como motivação para futuros estudos experimentais e teóricos relativo à aplicações práticas deste material.