

## **MECANISMOS DE INTERAÇÃO FÍSICO-QUÍMICA EM FIBRAS DE NANOTUBOS DE CARBONO VIA DINÂMICA-MOLECULAR**

DEUZIELE NASCIMENTO RODRIGUES<sup>1</sup>; MATEUS MENEGHETTI FERRER<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Pelotas-UFPEL – [deuzielerodrigues@gmail.com](mailto:deuzielerodrigues@gmail.com)

<sup>2</sup>Universidade Federal de Pelotas-UFPEL – [mmferrer@yahoo.com.br](mailto:mmferrer@yahoo.com.br)

### **1. INTRODUÇÃO**

A fonte energética mais utilizada no mundo para a produção de energia elétrica é de origem fóssil e não renovável, como o petróleo, o carvão mineral e o gás natural. No entanto, a queima de combustíveis fósseis, principalmente de petróleo e carvão, tem elevada participação nas emissões dos gases de efeito estufa (GEE's) ao meio ambiente. O consumo excessivo dessas fontes tem sido motivo de grande preocupação, pois além de contribuir para o esgotamento permanente desses recursos naturais também contribui para o aquecimento global (CARVALHO, 2009).

O desafio de atender a uma crescente demanda global por energia e, simultaneamente, reduzir as emissões de dióxido de carbono no planeta tem encontrado o seu pilar na diversificação. Aumentar a variedade da matriz elétrica pode trazer benefícios significativos para a sociedade, a economia e o meio ambiente. A segurança energética do país pode ser melhorada, pois permite que haja mais fontes de produção de energia disponíveis em caso de falhas em uma delas. Outro aspecto importante é a possibilidade de se obter uma mistura de fontes de energia com menor impacto ambiental, já que a utilização de fontes renováveis pode diminuir as emissões de gases de efeito estufa (FERNANDES, GONZÁLEZ, VALDERRAMA, SILVA, MARQUES, 2020).

A diversificação da matriz elétrica também pode levar a um aumento da competitividade econômica, já que a utilização de diferentes fontes de energia pode gerar novas oportunidades de negócio. Dessa forma, a nanotecnologia vem despertando muito interesse nas comunidades científicas, e principalmente ao longo das últimas décadas muitos esforços foram feitos no sentido de atingir o tão desejado controle em nível atômico e molecular sobre os processos industriais (HERBST, MACEDO, ROCCO, 2004). Desde então, muito se tem avançado no desenvolvimento de técnicas e tecnologias empregadas na formação e

caracterização de diversos tipos de nanoestruturas, bem como em investigações sobre muitas de suas interessantes propriedades e potenciais aplicações, em áreas diversas como eletroeletrônica, medicina, agricultura e pecuária e meio ambiente (SANFELICE, PAVINATTO, CORRÊA, 2022).

Com o surgimento dos materiais nanométricos, e em função deles, novas técnicas de caracterização foram projetadas e implementadas. Um dos frutos desse interesse pelo domínio das pequenas dimensões foi a obtenção serendípica dos nanotubos de carbono (NC) sintetizados pela primeira vez em 1991 por Iijima (HERBST, MACEDO, ROCCO, 2004). Os nanotubos de carbono possuem potencial para aplicações que envolvam a necessidade de dissipação de calor, uma vez que apresentam alta estabilidade e condutividade térmica (STEFANO et al., 2014). As propriedades elétricas, magnéticas, ópticas e mecânicas fazem dos nanotubos de carbono nanoestruturas fascinantes e atrativas para muitas aplicações, principalmente no campo da nanotecnologia.

Dessa forma, o presente trabalho tem como objetivo trazer o estudo de fenômenos a nível de nano escala de um nanomaterial os nanotubos de carbono, e sua eficiência quanto a geração de energia representando a interação entre os átomos em forma de simulação da dinâmica molecular, vale ressaltar a importância desse tipo de estudo para contribuição de estudos experimentais e sobretudo deste material que é capaz de gerar energia através da torção de vários fios de nanotubos de carbono, alcançando uma escala impossível de serem vistos a olho nu.

A construção do estudo da dinâmica molecular se dá a partir da simulação atomística da torção das fibras de nanotubos de carbono, que busca reproduzir de forma virtual os comportamentos atômicos utilizando como método de trabalho a ferramenta LAMMPS, que tem sua importante contribuição para os estudos de comportamento de sistemas e propriedades termodinâmicas, reproduzindo de forma virtual comportamentos reais através da simulação dos comportamentos atômicos.

## **2. METODOLOGIA**

O trabalho consiste primeiramente na revisão bibliográfica referente a demanda energética nos tempos atuais, em seguida o levantamento estrutural do material de forma isolada que é o nanotubo de carbono, para então seguir a partir dele com a modelagem dos fios de nanotubos entrelaçados formando fibras. A construção das fibras de nanotubos serão utilizados para simulações atomística,

visando compreender a dinâmica molecular e sua importância para o estudo dos nanomateriais, utilizando uma linguagem em códigos com a ferramenta LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), com etapas realizadas nos laboratórios Campus UFPel e Campus Anglo.

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O presente trabalho encontra-se na fase inicial, com levantamento de dados da literatura e conhecimento no que se refere a matriz energética, importante ressaltar que este trabalho vai além de estudar propriedades dos nanotubos de carbono bem como sua contribuição para os estudos experimentais a partir da simulação da dinâmica molecular.

### 4. CONCLUSÕES

A proposta de trabalho visa compreender comportamentos de sistemas reproduzindo de forma virtual a partir da simulação atomística, mais precisamente estudar a eficiência de nanotubos de carbono para futuras aplicações energéticas.

### 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CARVALHO, J. F. O Declínio da Era do Petróleo e a Transição da Matriz Energética Brasileira para um Modelo Sustentável. 2009. Tese (doutorado em Energia) -PPGE-USP, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009.

FERNANDES, J. A.F.; GONZÁLEZ, C.; VALDERRAMA, A.; SILVA, L. N.A.; MARQUES, E.R. F. Energias renováveis: Fonte de energia limpa? *In*: XI Congresso Brasileiro de Gestão Ambiental, Vitória -ES, 2020.

HERBST, M. H.; MACÊDO, M. I. F.; ROCCO, A. M. **Tecnologia dos nanotubos de carbono: tendências e perspectivas de uma área multidisciplinar**. Química nova, v. 27, n. 6, p. 986–992, 2004.

SANFELICE, R. C.; PAVINATTO, A.; CORRÊA, D. S. Introdução à Nanotecnologia. Em: **Nanotecnologia Aplicada a Polímeros**. [s.l.] Editora Blucher, 2022. p. 27–48.

STEFANOV, V. et al. Properties assessment of multiwalled carbon nanotubes: A comparative study. *Synthetic Metals*, v. 197, 2014. ISSN 03796779.