

# Estudo da dinâmica de materiais porosos nanoestruturados utilizando potenciais reativos.

Bruno Henrique Morini, Ricardo Paupitz, UNESP Rio Claro, IGCE, física, bruno.morini@unesp.br.

Palavras Chave: *Dinâmica molecular, grafeno, potenciais reativos.*

## Introdução

Simulações computacionais possibilitam o controle das variáveis envolvidas na dinâmica molecular, se baseando nos modelos matemáticos que melhor descrevem tais sistemas. Assim, é necessário que o pesquisador se familiarize com as ferramentas fundamentais para o estudo da dinâmica molecular, como, nesse caso, o *LAMMPS (Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)* e *VMD (Visual Molecular Dynamics)*. Experiências recentes demonstram como um nanotubo de carbono pode ser descompactado em grafeno, porém o caminho oposto também pode ser feito, como demonstrado em (Kit et al, 2012), O estudo descrito nesse trabalho buscou a adaptação desse processo, onde a partir de simulações uma folha de grafeno sobre efeito de torção e sobre condições ideais pode ser transformada em um nanotubo.

## Objetivo

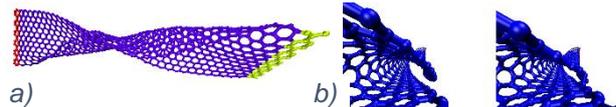
Para esse estudo foram utilizadas simulações computacionais por meio de algoritmos que possibilitam a modelagem matemática de métodos clássicos de dinâmica molecular, através de potenciais reativos como *AIREBO (Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order)* e *Reaxff (Reactive force field)*, potenciais esses presentes no programa LAMMPS, o que possibilitou a adaptação do processo descrito em (Kit et al, 2012) que descreve a transformação de folhas de grafeno em nanotubos por meio de torção.

## Material e Métodos

Foi construída uma folha de grafeno utilizando o *VMD*, A folha era aquecida a 300 K e relaxada por  $3 \times 10^3$  femtosegundos. Uma das bordas da folha permanecia imóvel, enquanto na outra borda era aplicado um torque, o que causava a torção na folha. As configurações das extremidades laterais da folha eram alteradas entre *Armchair* e *ZigZag*, para facilitar a formação das ligações, assim como a temperatura e velocidade de rotação. Para essa dinâmica foi utilizado o potencial *Reaxff*.

## Resultados e Discussão

Foi possível verificar a formação de grafenos de duas camadas, devido ao colapso da folha de grafeno submetida a rotação.



**Figura 1** - Simulação com temperatura estabilizada a 300 K e o período de rotação em  $3 \times 10^4$  femtosegundos, a) formação do grafeno de duas camadas no centro da estrutura, b) formação de ligações.

Foi possível notar a formação e quebra de ligações entre as bordas do grafeno, como mostrado na figura 1, porém não é possível destacar o processo de formação de um nanotubo, pois devido a existência das forças de van der Waals a folha se colapsa e forma um grafeno de duas camadas, essa questão deve ser resolvida alterando as dimensões da folha, o que deve possibilitar a interação apenas das bordas.

## Conclusões

Os resultados sugerem que de fato é possível formar ligações entre as bordas da folha em condições ideais, por meio de torção, no entanto, o período de rotação da borda da folha, a temperatura e a geometria do sistema devem ser ajustadas de maneira precisa. O próximo passo é o uso do conhecimento adquirido até o presente momento para realizar os ajustes necessários das variáveis envolvidas na simulação para obter o resultado desejado.

## Agradecimentos



<sup>1</sup> PLIMPTON, S. *Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics*. [S. l.]: J Comp Phys, 1995. Disponível em: <https://lammps.sandia.gov/>. Acesso em: 16 ago. 2019.

<sup>2</sup> KIT, O. O.; TALLINEN, T.; MAHADEVAN, L.; TIMONEN, J.; KOSKINEN, K. Twisting graphene nanoribbons into carbon nanotubes. *PHYSICAL REVIEW*, [S. l.], ano 085428, p. 1-9, 23 fev. 2012. *E-book*.

<sup>3</sup> Humphrey, W., Dalke, A. and Schulten, K., "VMD - Visual Molecular Dynamics", *J. Molec. Graphics*, 1996, vol. 14, pp. 33-38.