

Uso da Dinâmica Molecular Reativa para o estudo das propriedades mecânicas dos NTBs de BN/C

Tainá de Sousa Oliveira¹, Marcelo Lopes Pereira Júnior², Luiz Antônio Ribeiro Júnior¹

¹Universidade de Brasília, Instituto de Física, Brasília, Brasil. ² Faculdade de Tecnologia, Universidade de Brasília, Brasília, Brasil.

e-mail: tainaoliveiraif@outlook.com

Os nanotubos de carbono (CNTs, do inglês *Carbon Nanotubes*) têm recebido cada vez mais atenção da comunidade científica nos últimos anos devido às inúmeras propriedades que superam as de qualquer material conhecido até agora. Os CNTs apresentam propriedades mecânicas interessantes, pois são muito resistentes e flexíveis, além de possuírem alta condução térmica e elétrica, possibilitando sua aplicação em diversas áreas. Existe uma corrida tecnológica para a fabricação desse material em escala industrial, mas algumas limitações precisam ser superadas, mostrando a necessidade de pesquisas constantes para entender os mecanismos envolvidos nesses materiais, conforme a aplicação desejada. Por outro lado, nanotubos de nitreto de boro (BN) também têm sido objeto de estudo por apresentarem propriedades mecânicas e térmicas surpreendentes quando comparados a outros materiais, além de uma grande similaridade com sistemas baseados em grafeno. Nessa perspectiva, simulações de dinâmica molecular computacional reativa foram realizadas para estudar a resistência mecânica e o padrão de fratura de aglomerados de nanotubos mesclados e em diferentes concentrações de nitreto de boro e de grafeno, usando uma deformação de torção longitudinal. Os NTBs (do inglês, *Nanotube Bundles*) aqui considerados são compostos por sete nanotubos de BN/C, sendo seis dispostos em configuração hexagonal, e um nanotubo central, variando a quantidade de nanotubos de BN em relação aos nanotubos de grafeno. Para realizar as simulações, utilizou-se o software de código aberto LAMMPS (do inglês, *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*), com potencial interatômico ReaxFF (do inglês, *Reactive Force Field*). O estudo foi feito com bundles de diferentes diâmetros (~ 4 e ~ 18 Å) e quiralidades (armchair, zigzag e quiral), além da natural concentração entre nanotubos de nitreto de boro e grafeno. Os resultados indicam que os padrões de fratura dos NTBs aqui considerados dependem tanto do diâmetro (quanto maior o diâmetro, menos suscetível a torção) e também da quiralidade. Apesar da grande similaridade de sistemas de nitreto de boro com grafeno, e das inúmeras aplicações desses sistemas, os nanotubos formados por átomos de carbono se mostram mais resistentes.

Agradecimentos:

Os autores agradecem à Fundação de Amparo à Pesquisa do Distrito Federal (FAPDF) e ao Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Referências:

- [1] Wen, F. *et al.* The Journal of Physical Chemistry C, 2011, 115, 14025-14030.
- [2] Liew, K. *et al.* Journal of Applied Physics, 2006, 99, 114312.