

Estudo computacional de nanotubos de carbono

Maria Helena Garrido Barretto Reis*, Alexandre Fontes da Fonseca

Resumo

Um estudo introdutório da estrutura e comportamento de nanotubos de carbono é apresentado aqui utilizando métodos computacionais de simulação atômica por dinâmica molecular clássica. Os potenciais conhecidos pelas siglas AIREBO (Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order) [1] e CHARMM (Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics) [2] foram utilizados para calcular as forças de interação entre os átomos que compõem esses sistemas. Comparamos os resultados para a distância interatômica e ângulos entre as ligações químicas dos nanotubos otimizados com ambos os potenciais. Investigamos, também, a estrutura de nanotubos curvados e, em particular, a sua estabilidade térmica.

Palavras-chave:

Dinâmica Molecular, Nanotubo de carbono, defeitos.

Introdução

Devido as suas propriedades especiais, nanotubos de carbono (NTC) são considerados muito versáteis em muitos tipos de aplicações tecnológicas. Eles são, ao mesmo tempo, resistentes mecanicamente e excelentes condutores de eletricidade e calor [3]. Motivados por esse interesse, realizamos um estudo computacional, baseado em métodos de dinâmica molecular clássica, da estrutura e equilíbrio térmico de NTCs retos e curvados.

Os pacotes de visualização molecular VMD (*Visual Molecular Dynamics*) [4] e de simulação computacional LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) [5] foram usados.

Resultados e Discussão

Primeiro, para aprender a utilizar o LAMMPS, realizamos testes de otimização da estrutura de NTCs curvados, gerados com um *script* dentro do programa VMD para gerá-los. O resultado para um NTC (10,0) está mostrado na figura 1 abaixo:

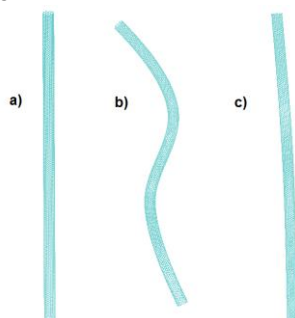


Figura 1. NTC (10,0) na sua forma original (a), deformado através de um script do VMD (b), e otimizado com o AIREBO (c).

Observamos que se a deformação gerada no NTC é suave, a curvatura se desfaz. Decidimos criar, então, NTCs com maior curvatura, a tal ponto que defeitos na sua estrutura cristalina se formam. O resultado está mostrado na figura 2.

Em seguida, obtemos e testamos os parâmetros do CHARMM para simular NTCs, comparando os resultados com aqueles obtidos com o AIREBO. Verificamos que a estrutura otimizada de um NTC possui as mesmas distâncias interatômicas e ângulos entre as ligações. A figura 3 mostra os resultados.

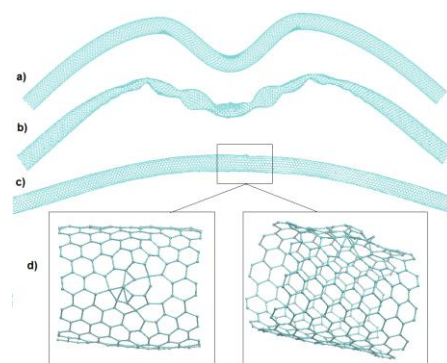


Figura 2. NTC em forma de “m”. Estado inicial (a), após minimização de energia (b), e após simulação a 400 K por 25 ps (c). Detalhes da estrutura de alguns defeitos que permaneceram após a simulação (d).

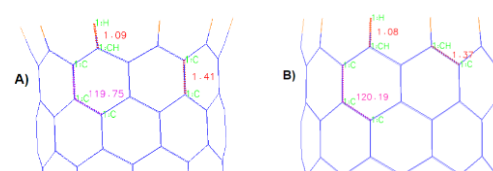


Figura 3. Pedaco do NTC (10,0) otimizados com AIREBO (A) e CHARMM (B). No detalhe, vemos a distância (em Å na cor vermelha) entre os átomos de carbono e entre carbono e hidrogênio, e o ângulo entre duas ligações carbono-carbono (em graus na cor lilás).

Conclusões

NTCs curvados só permanecem assim se defeitos estiverem presentes na região de curvatura. Mostramos que com parâmetros adequados, o CHARMM pode ser usado no estudo computacional de NTCs.

Agradecimentos

MHGBR agradece o suporte financeiro do PIBIC/CNPq. AFF agradece ao CNPq e a FAPESP (#2016/00023-9) pelo financiamento de projetos.

REFERÊNCIAS

- Stuart, S. J.; Tutein, A. B.; Harrison, J. A. *J. Chem. Phys.* **2000**, *112*, 6472.
- MacKerell Jr., A. D.; *et al.* *J. Phys. Chem. B* **1998**, *102*, 3586.
- Baughman, R. H.; Zakhidov, A. A.; de Heer, W. A. *Science* **2002**, *297*, 787.
- Disponível em <<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/current/ug/>>.
- Plimpton, S. J. *Comp. Phys.* **1995**, *117*, 1.