



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ
CENTRO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Programa PIBIC-UFPI (2014/2015) – Relatório Parcial

PLANO DE TRABALHO

“Estudo teórico do efeito de pressões extremas em nanotubos de carbono”

PROJETO DE PESQUISA

“ESTUDO COMPUTACIONAL DAS PROPRIEDADES VIBRACIONAIS E ELETRÔNICAS SISTEMAS HÍBRIDOS BASEADOS EM NANOTUBOS DE CARBONO SUJEITOS A DEFORMAÇÕES ESTRUTURAIS”

Orientando: Seu nome aqui

Orientador: Acrisio Lins de Aguiar

Teresina-PI, Fevereiro de 2015

INTRODUÇÃO

Este trabalho teve como objetivo simular diferentes tipos de Nanotubo de Carbono computacionalmente. Foi utilizada a linguagem de programação C++ e o compilador dev-C++. Quanto a visualização do resultado final foi usado o software de visualização Chemcraft. Muito antes do termo nano ser adotado na comunidade científica, o físico norte-americano Richard Phillips Feynman (1918-1988) em sua palestra “There’s Plenty of Room at the Bottom” (Há muito espaço lá em baixo) ocorrida em 1959 num encontro da Sociedade Americana de Física intrigou varios ouvintes ao falar em manipulação de objetos em escala atômica. A partir de 1987, foram surgindo os primeiros trabalhos relacionados a nanotecnologia. Foi com o invento do microscopio de tunelamento (STM- Scanning Tunneling Microscope) que se tornou possivel a manipulação de materiais nanométricos.

A Nanociência trata do estudo da manipulação de materiais na ordem do nanometro, na ordem de 10^{-9} metros, afim de se criar e modificar estruturas maiores. Conhecimentos dela são aplicadas em diversas áreas como a Medicina, Engenharias, dentre outras ciencias. O carbono, unico elemento da tabela periodica capaz de formar alotropos de diferentes dimensionalidades, é um elemento quimico de grande utilidade. Elemento de maior abundancia no universo, ele é dito como o elemento base pra vida terrestre. Também importante no meio científico, o carbono é comumente encontrado na natureza na forma de seus alotropos, dentre eles o grafite e o diamante. O diamante é umas das mais fortes estruturas já encontradas mas é do grafite que a folha de grafeno é obtida. E é esse o material feito de atomos de carbono que tem sido alvo de grandes projetos.

O grafeno nada mais é que uma estrutura bidimensional feita de atomos de carbonos com a espessura do mesmo. A partir do grafeno obtemos o Nanotubo de Carbono. Nanotubos de carbono (CNTs), também alotropo do carbono, são estruturas cilíndricas e ocas geradas pelo enrolar de uma folha de grafeno, tendo assim a superfície muito fina, espessura de um átomo de carbono. Podem ser separados em dois conjuntos: de uma única só superfície de grafeno (SWNTs) ou mais folhas enroladas

de forma concêntricas (MWNTs). CNTs são altamente resistentes à ruptura e possuem um grande poder relacionado a condutibilidade térmica. As propriedades estruturais do Nanotubo de Carbono definem suas características físicas e suas aplicações específicas, podendo ser ótimos condutores elétricos. Há controvérsias sobre a descoberta do Nanotubo de Carbono, entretanto foi a partir do trabalho do Sumio Iijima, um físico japonês, feito em 1991 que os Nanotubos de Carbono passaram a ter destaque no meio científico.

Em 1985 houve a descoberta de outro alotropo do carbono, o fulereno. Sendo uma nanomolécula esferoidal e ao contrário dos outros alotropos esse possui uma forma molecular. Com tantas descobertas envolvendo os alotropos do carbono parte considerável do meio científico se voltou para o estudo de suas propriedades e utilidades.

REVISÃO DA LITERATURA

METODOLOGIA

RESULTADOS E DISCUSSÃO

CONCLUSÃO

REFERÊNCIAS