



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO

Fundação Universidade Federal do ABC

Pró-Reitoria de Pesquisa

Av. dos Estados, 5001 · Santa Teresinha · Santo André/SP · CEP 09210-580

Bloco L · 3.º andar · Fone: (11) 3356.7619

propes@ufabc.edu.br

Projeto de Iniciação Científica - EDITAL 04/2022

Influência da tensão e de dopantes na adsorção de hidrogênio em folhas bidimensionais

Santo André, 2022

Resumo

A nanotecnologia é a ciência que estuda materiais em escala nanométricas (10^{-9}m) e tem tido grande atenção sobretudo após o isolamento e caracterização de diversas nanoestruturas como grafeno, fulereno e nanotubos. Em particular o grafeno é um grande alvo de estudos nas últimas duas décadas devido as suas incríveis propriedades mecânicas, térmicas e eletrônicas. Em razão dessa grande atenção, novas nanoestruturas têm sido propostas com base na adição de elementos diferentes do carbono, por meio da funcionalização destas estruturas. A partir destes novos materiais e da funcionalização se torna possível a obtenção de nanoestruturas com novas propriedades ajustadas mediante as funções desejadas. Neste projeto estudaremos a dinâmica de hidrogenação utilizando dinâmica molecular atomística completamente reativa do Octagrafeno e sua influência mecânica sobre tensão pós-adsorção de hidrogênio utilizando a Dinâmica Molecular reativa totalmente atomística.

Projeto

1.1 Introdução contextualizando o projeto

Desde meados do século XX é perceptível a crescente demanda de energia e a realidade é que grande parte deste requerimento de energia na atualidade é provido pelos combustíveis fósseis que não são de natureza renovável e a crescente contribuição para o efeito estufa que afeta negativamente o meio ambiente. Podemos observar o consumo de energia primária considerando a Figura 1.1, que apresenta graficamente tais fatores desde 1800 até 2008. Ao analisar o gráfico, é notável o aumento exponencial da dependência energética, mediante a década de 70, suprida pelo proveito utilitário de combustíveis fósseis como carvão, gás natural e petróleo que prejudicam a sustentabilidade ambiental.

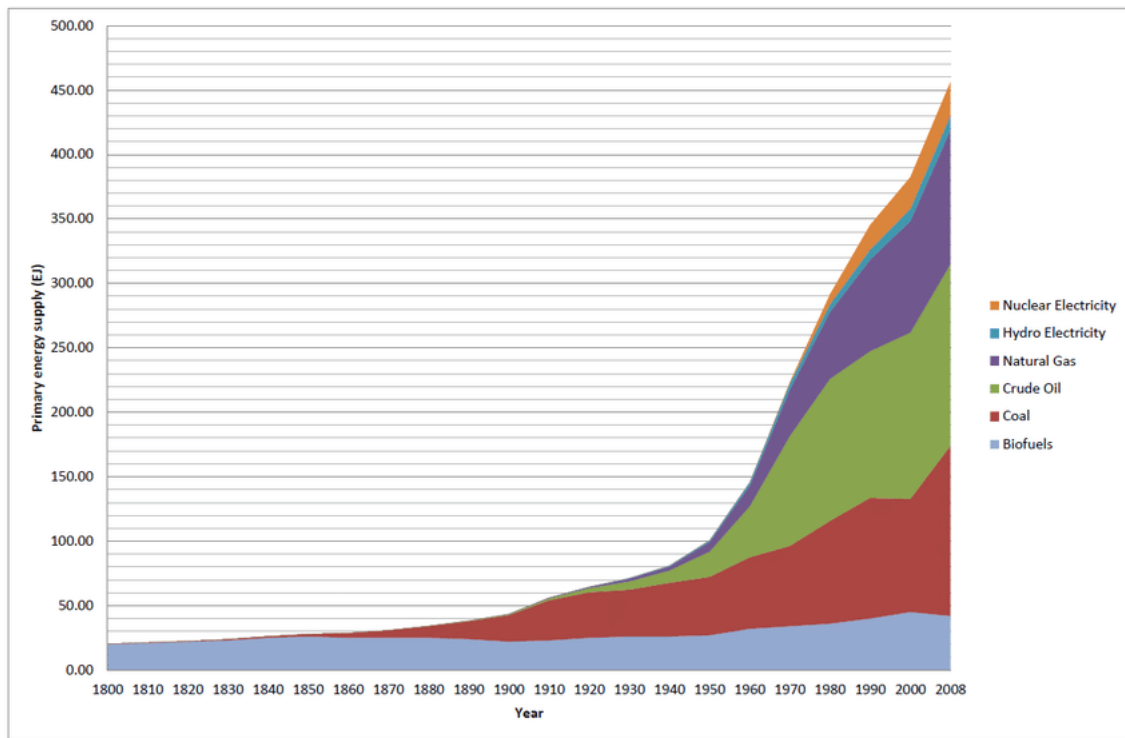


Figura 1.1: Representação gráfica do uso global de energia primária, 1800-2008. Fonte de dados: Smil (2010a). Obtido em [1]

Sendo assim, há grande motivação para os estudos de energias renováveis, em que é explícito a capacidade para preencher tais condições da infraestrutura energética. Dentre os recursos energéticos renováveis, o hidrogênio é considerado o combustível mais ecológico[2]. Além disso, apresenta características interessantes para o setor de energia, bem como elevada quantidade de energia, baixa densidade e tendo seu produto de reação o H_2O [3]. Segundo o cenário atual, o mercado de hidrogênio apresenta uma configuração e aptidão para substituir a atual infraestrutura energética embasada em combustíveis fósseis [2]. Contudo, entre as maiores dificuldades relacionadas ao hidrogênio como fonte energética é a complexidade de seu armazenamento, à vista de que as mudanças de estados físicos ocorrem em temperaturas negativas muito baixas [3].

Há diversas opções possíveis para o armazenamento do hidrogênio e uma delas que vêm crescendo é a nanotecnologia, aonde cientistas partiram da premissa de que ao manipular e fabricar com

precisão atômica desenhos em níveis nanométricos, poderiam alterar propriedades de certos materiais e estas pequenas alterações produziriam estruturas com certas propriedades físicas e químicas completamente diferenciadas [4]. Isso acarretou estudos e desenvolvimentos de nanoestruturas funcionais e eficientes para tarefas desejadas. Das principais formas de estruturas organizadas na escala nanométrica (10^{-9}m) estão as estruturas compostas por carbono, que além da possibilidade de produção dos mesmos a partir de matéria-prima renovável [5], há uma vasta diversidade disposição de arranjos novos.

Na Figura 1.2 apresentamos alguns exemplos dessas nanoestruturas formadas por carbono como grafite, diamante, fulereno, nanotubo e o grafeno, respectivamente em Figura 1.1 (a) a (f),

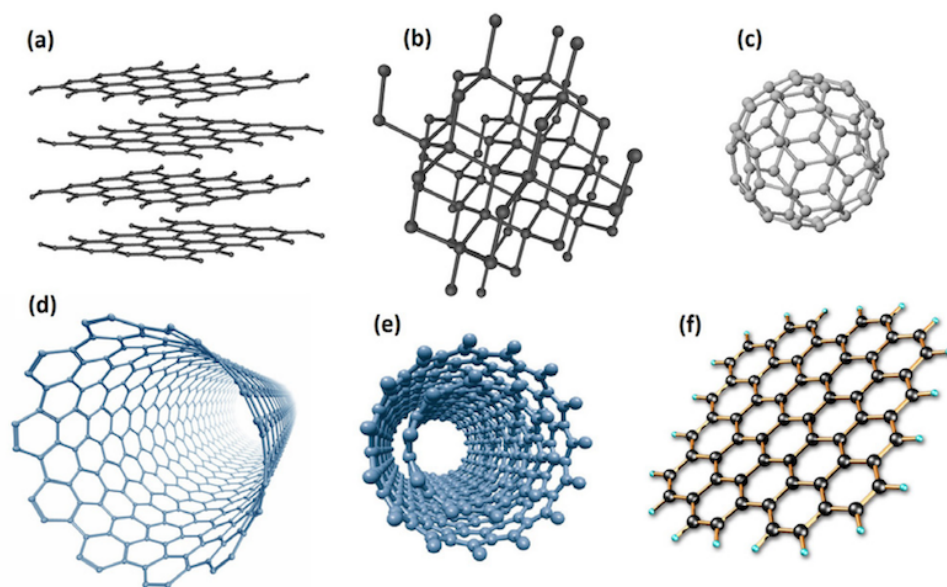


Figura 1.2: Representação esquemática de diferentes alótropos de carbono: a) grafite, b) diamante, c) fulereno, d) nanotubo de carbono de parede simples, e) nanotubo de carbono de parede múltipla, f) grafeno. Retirado de [6]

Entre as estruturas estáveis de carbono, o grafeno é o alótropo bidimensional que, formado por uma rede hexagonal de átomos de carbono sp^2 ligados covalentemente que são imprensados entre duas nuvens de elétrons p [7], pode ser considerado o mais estável e um dos principais nas pesquisas de materiais na atualidade.

Estimulado pelo notável interesse de grafeno, um grande número de novas estruturas de carbono foram propostas e investigadas nos últimos anos, sendo o grafeno uma estrutura de favo de mel perfeita com simetria. Inspirado em estudos recentes, no qual o foco são vários anéis poligonais de carbono, foi proposto uma nanofolha 2D estável com ligações sp^2 periódicas composta por octógonos e quadrados, formando uma célula unitária retangular [8].

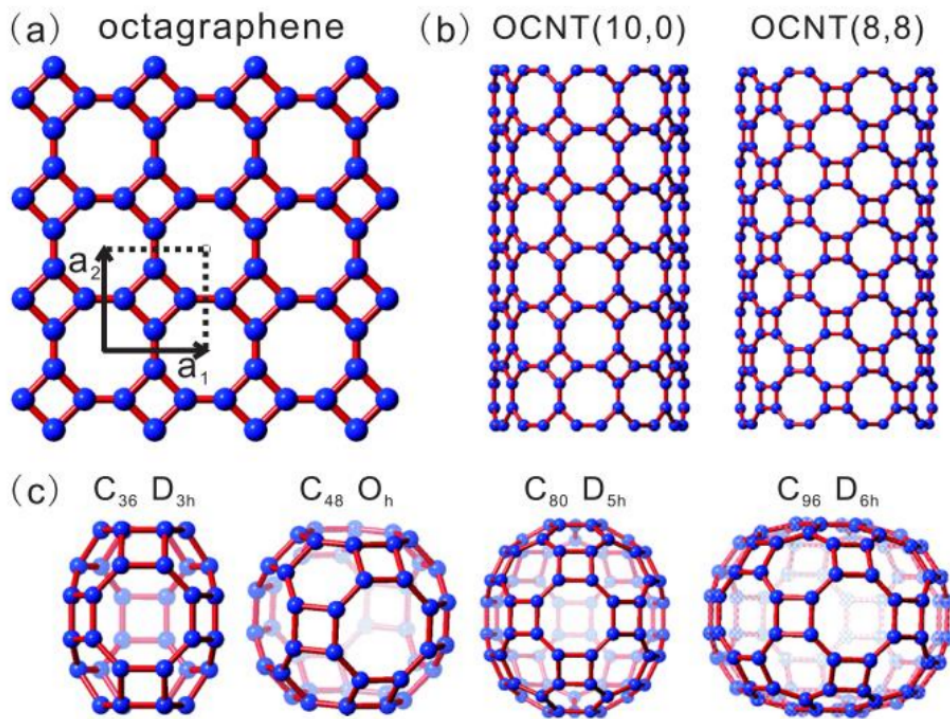


Figura 1.3: Representação esquemática das estruturas de (a) octagrafeno, onde uma unidade celular é indicada com os vetores unitários a^1 e a^2 ; (b) sawtooth de parede única (10,0) e nanotubos armchair(8,8) laminados de octagrafeno; e (c) fulerenos não convencionais de C_{36} , C_{48} , C_{80} e C_{96} obtidos a partir de octagrafeno. Retirado de [8].

Esta estrutura apresenta um comportamento semimetálico e não magnético, apresentando assim, importantes aplicações na funcionalização covalente. Existe também a utilização como circuito molecular ou nanocarregador para liberação de drogas [8]. No quesito de propriedades, o octagrafeno tem a densidade de $0,68 \text{ mg/m}^2$, módulo de Young de 306 N/m , resistência à ruptura de $34,4 \text{ N/m}$, e o coeficiente de Poisson de $0,13$. Pode ser a folha de carbono periódica mais forte depois do grafeno até agora [9]. Com tais propriedades, o octagrafeno terá também um impacto crucial na física, química, ciência dos materiais e engenharias.

1.2 Breve descrição dos objetivos e metas

O dissertado visa o desenvolvimento do aluno considerando a proporcionalidade de diversas compromissos acadêmicos, como a exposição de relatórios semanais, estimulação do pensamento científico e a criatividade, análises adotando o uso leituras de artigos, pesquisas feitas por outras mídias como revistas científicas e livros, utilização da metodologia científica e acrescentar o acesso e a integração do estudante a cultura científica concebendo desafios para o desenvolvimento de um projeto de Iniciação Científica (IC).

Determinamos que o estudo será feito manipulando a Simulação de Dinâmica Molecular Clássica (SDMC), visando observar as propriedades de tensão e de dopantes na adsorção de folhas bidimensionais. Particularmente iremos investigar:

- Estudar dinâmica molecular clássica e reativa;
- Desenhar estruturas em nível atômico;
- Estudar a dinâmica de hidrogenação;
- Estudar a influência do armazenamento de hidrogênio nas propriedades mecânicas de folhas bidimensionais;

- Estudar a influência de dopantes na adsorção de hidrogênio em folhas bidimensionais;
- Estudar a relação entre tensão aplicada a folha bidimensional e o armazenamento de hidrogênio.

Portanto, o projeto concerne grande interdisciplinariedade, ao qual se concilia com o projeto pedagógico da UFABC, estabelecendo ligações entre física, computação e engenharia.

1.3 Metodologia

Os estudos a partir de simulações computacionais baseadas em dinâmica molecular clássica e reativa utilizará o pacote computacional Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [10], que opera com os princípios da Mecânica Newtoniana. Além do ensemble NVT, com a temperatura controlada pelo termostato de Nosé-Hoover [11], aplicaremos o campo de força clássico reativo ReaxFF [12] que consiste na elaboração de concretização e quebra de ligações químicas, principalmente no quesito da hidrogenação. O programa Visual Molecular Dynamics (VMD) [13] será necessário para visualizar, analisar e criar estruturas para o melhor entendimento do projeto.

Utilizaremos estruturas de Octagrafeno. Uma vez criadas, as estruturas serão submetidas a uma minimização de energia utilizando o algoritmo do gradiente conjugado e sua estabilidade térmica a 300K será testada. Com a geometria otimizada e verificação de sua estabilidade térmica será realizada a hidrogenação de sua superfície. Após isso, iremos tensionar a nanofolha partindo de fundamentos newtonianos e entender as influências mecânicas posteriormente a adsorção de hidrogênio.

1.4 Descrição da viabilidade da execução do projeto

Este projeto utilizará conceitos viáveis a um aluno do curso de Bacharelado em Ciência e Tecnologia, sendo conteúdos abordados que foram ou serão estudados pelo orientando durante o período de execução do mesmo. Assim sendo, este projeto se desempenha como a iniciação de contato com a pesquisa do discente, em que, somado com reuniões semanais, terá auxílio de seminários promovidos pela instituição.

Considerando a disponibilidade dos recursos existentes na universidade, onde se encontra um ótimo parque computacional, salientando o Cluster Titânio, é proeminente as circunstâncias exequíveis fundamentais para o desenvolvimento do projeto. Além disso, o orientador detém associação com a Universidade Estadual de Campinas (Unicamp) e Universidade de Rice, em Houston, Estados Unidos. Tal conexão dispõe acessibilidade ao menos dois clusters da Unicamp e um conjunto de clusters da Rice.

Para concluir, o projeto de IC constitui temas retratados em várias revistas e artigos científicos com potencial resultante em avanços nas pesquisas de nanoestruturas e até mesmo armazenamento de hidrogênio e suas aplicações.

1.5 Cronograma

Este projeto com duração de 1 ano buscará conciliar a pesquisa com os períodos de estudo da graduação.

Quadrimestre/Atividade	3º/2022	1º/2023	2º/2023
Atualização das referências bibliográficas	X	X	X
Estudo e testes com o código LAMMPS	X	X	X
Criação de modelos atomísticos	X	X	
Teste de Estabilidade	X		
Simulação de hidrogenação das folhas bidimensionais	X	X	X
Estudo de propriedades mecânicas		X	X
Escrita do relatório final			X

Tabela 1.1: Cronograma do projeto

Referências Bibliográficas

- [1] J. Floyd, “Centre for australian foresight trend briefing paper: Energy descent, transition and alternatives to 2050,” 07 2015.
- [2] S. Sharma, S. Agarwal, and A. Jain, “Significance of hydrogen as economic and environmentally friendly fuel,” *Energies*, vol. 14, no. 21, p. 7389, 2021.
- [3] T. E. R. Estêvão *et al.*, “O hidrogénio como combustível,” 2008.
- [4] J. Hulla, S. Sahu, and A. Hayes, “Nanotechnology: History and future,” *Human & experimental toxicology*, vol. 34, no. 12, pp. 1318–1321, 2015.
- [5] F. M. Chohfi and G. P. Valença, “Novos produtos e energia a partir de biomassa, uma matéria prima abundante e renovável para o brasil,” *Revista Agrogeoambiental*, 2009.
- [6] A. J. Zarbin and M. M. Oliveira, “Carbon nanostructures (nanotubes and graphene): Quo vadis,” *Química Nova*, vol. 36, no. 10, pp. 1533–1539, 2013.
- [7] M. Pykal, P. Jurečka, F. Karlický, and M. Otyepka, “Modelling of graphene functionalization,” *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 18, no. 9, pp. 6351–6372, 2016.
- [8] X.-L. Sheng, H.-J. Cui, F. Ye, Q.-B. Yan, Q.-R. Zheng, and G. Su, “Octagraphene as a versatile

- carbon atomic sheet for novel nanotubes, unconventional fullerenes, and hydrogen storage,” *Journal of Applied Physics*, vol. 112, no. 7, p. 074315, 2012.
- [9] G. S. Fabris, C. A. Paskocimas, J. R. Sambrano, and R. Paupitz, “New 2d nanosheets based on the octa-graphene,” *Journal of Solid State Chemistry*, vol. 290, p. 121534, 2020.
- [10] S. Plimpton, “Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics,” *Journal of computational physics*, vol. 117, no. 1, pp. 1–19, 1995.
- [11] W. G. Hoover, “Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions,” *Physical review A*, vol. 31, no. 3, p. 1695, 1985.
- [12] A. C. Van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, and W. A. Goddard, “Reaxff: a reactive force field for hydrocarbons,” *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 105, no. 41, pp. 9396–9409, 2001.
- [13] W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, “Vmd: visual molecular dynamics,” *Journal of molecular graphics*, vol. 14, no. 1, pp. 33–38, 1996.