



**Universidade:
presente!**

UFRGS
PROPEAQ



XXXI SIC

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

Evento	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2019
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	ANÁLISE COMPUTACIONAL DA MORFOLOGIA E ESTRUTURA DE CARBON QUANTUM DOTS POR SIMULAÇÃO MOLECULAR
Autor	MATHEUS TEIXEIRA NOVÔA
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

ANÁLISE COMPUTACIONAL DA MORFOLOGIA E ESTRUTURA DE CARBON QUANTUM DOTS POR SIMULAÇÃO MOLECULAR

Autor: Matheus Teixeira Novôa
Orientador: André Rodrigues Muniz

Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

Carbon Quantum Dots (C-dots) são nanopartículas constituídas por fragmentos de grafeno empilhados, possuindo luminescência e biocompatibilidade, úteis para aplicações em sensores e bioimagem. Estas propriedades dependem fortemente de detalhes estruturais, como a fração de carbono cristalino/desordenado, e da natureza e distribuição dos grupos funcionais nitrogenados e oxigenados presentes. Neste estudo buscou-se desvendar maiores detalhes da estrutura atômica de *C-dots*, utilizando simulações de Dinâmica Molecular (MD) e de Monte Carlo (MC), conduzidas no *software* LAMMPS, baseadas em informações experimentais da literatura, de modo a fornecer estruturas mais realistas para estudos da relação estrutura-propriedades destes materiais. Modelos relativamente simplificados vêm sendo usados em estudos teóricos. Em trabalhos anteriores, já foram propostas diferentes estruturas baseadas em observações experimentais, variando o grupo funcional e seu arranjo ao longo do material (na superfície e no interior). Atualmente, está sendo investigada a possibilidade de existirem ligações sp^3 conectando os fragmentos constituintes através de átomos de carbono presentes entre camadas (CEC), usando o método MC. Diferentes quantidades e distribuições iniciais de CEC foram simuladas com o objetivo de observar as formas como estes se arranjam na reconstrução das superfícies (em fase amorfa ou cristalina), também comparando com resultados experimentais. Além disso, espectros de infravermelho foram simulados, com o pacote ASE (*Atomic Simulation Environment*), com o objetivo de fornecer subsídios para interpretação de resultados experimentais, e futura validação das estruturas propostas. Os resultados mostram que tanto estruturas formadas por fragmentos simples empilhados (tradicionalmente usadas) quanto por fragmentos empilhados e interconectados conseguem explicar algumas das observações experimentais. Estruturas contendo conexões entre camadas e/ou contendo grupos funcionais no seu interior conseguem explicar de forma mais completa as características tipicamente observadas por técnicas de caracterização, sendo promissoras para futuros estudos.