



## SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2016
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Desenvolvimento de Novos Materiais Nanoporosos Baseados em Carbono usando Simulação Molecular
<b>Autor</b>	JÚLIA KLEINPAUL
<b>Orientador</b>	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

## **Desenvolvimento de Novos Materiais Nanoporosos Baseados em Carbono usando Simulação Molecular**

Júlia Kleinpaul e André Rodrigues Muniz

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

A busca de nanoestruturas porosas com alta estabilidade mecânica e propriedades versáteis é de grande interesse prático, devido a sua leveza, uma elevada razão área/volume, e a possibilidade de apresentar uma distribuição de diâmetros uniforme. Neste trabalho, mostramos como fulerenos porosos, nanomateriais baseados em carbono introduzidos recentemente na literatura, podem ser usados como bloco fundamental na criação de nanoestruturas porosas bi- e tridimensionais. É mostrado que diferentes combinações de ligações levam à formação de nanomateriais com porosidades bem definidas e variadas. Simulações de dinâmica molecular clássica empregando o potencial interatômico ReaxFF foram usadas para analisar a estabilidade de diversas estruturas formadas pela coalescência de fulerenos porosos, e para determinar as propriedades mecânicas do material resultante. Os resultados mostram que esta classe de nanomateriais apresenta boa estabilidade térmica e alta resistência mecânica, condições essenciais para a síntese e utilização desses materiais em aplicações práticas. Estas propriedades tornam estes materiais interessantes para aplicações na separação ou armazenamento de gases, absorção de contaminantes, suportes para catalisadores, entre outros.