

estudo sobre viscosidade de nanotubos de carbono (C) e nitreto de boro (bn)

JARBAS UBIRATAN VIEIRA DE SOUZA (Autor), Ronaldo Júnio Campos Batista (Orientador)

A Nanociência tem contribuído com várias áreas de pesquisa, como biologia, física, química, etc. Sendo então, uma importante área de estudo, com impacto relevante nas últimas décadas. Com essa afirmação em mente, este trabalho teve foco no estudo de nanoestruturas, investigando propriedades dinâmicas de nanotubos de carbono e nitreto de boro. Para estes fins, foram utilizados os potenciais empíricos: Lennard-Jones e Reaxff, e cálculos de primeiros princípios usando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) com interações de Van Der Waals em conjunto ao método SIESTA. Primeiramente investigamos nanotubos de Carbono (NTC 's) com diversos diâmetros, interagindo com moléculas de água em seu interior, aplicando velocidade constante ao tubo, observando a interação tubo/água até que atingissem o estado estacionário (tanto o tubo como as moléculas estejam em velocidades próximas e contantes). Em seguida, foi feito o mesmo para nanotubos de nitreto de boro (NTBN 's), uma vez que poderíamos analisar como era dada transferência de movimento linear em ambos tipos de nanotubos e compará-las.

Instituição de Ensino: Universidade Federal de Ouro Preto