XXX Encontro Anual de Iniciação Científica
VII Encontro Anual de Iniciação Científica Júnior
eaic 2021

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE POLíMEROS

Derik William Gryczak (PIBIC/FA), Lucas Stori de Lara, e-mail: lslara@uepg.br.

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Física.

Física, Física Geral, Física da Matéria Condensada.

Palavras-Chave: *Dinâmica Molecular, Polímeros, Grafeno.*

Resumo

Este trabalho tem o objetivo de verificar a estabilidade e molhabilidade dos polímeros condutores poli p-propilino (PPP) e poli p-fenileno vinileno (PPV) com uma folha de grafeno ou oxido de grafeno, utilizando como meio ferramentas da dinâmica molecular clássica.

Introdução

Nos últimos anos vemos um crescente interesse nos estudos envolvendo o grafeno e suas propriedades [1], neste contexto a dinâmica molecular clássica é uma importante ferramenta para prever propriedades físicas de sistemas moleculares antes que estes sejam criados experimentalmente.

A fim de explorar as propriedades do grafeno e do oxido de grafeno com polímeros condutores calculamos medidas como a função distribuição radial de pares g(r), perfis de densidade em uma e duas dimensões e tensão interfacial a partir da integral da pressão lateral (equação 1) [2]:

$$\gamma = \frac{1}{2}\int_0^Z \left(P_{ZZ} - \frac{1}{2}\left(P_{XX} + P_{YY}\right)\right) dZ$$

Equação 1. Tensão interfacial γ.

Material e Métodos

Para a realização das simulações deste trabalho utilizamos o pacote de dinâmica molecular clássica *LAMMPS*, no qual criamos sistemas organizados como na figura 1.

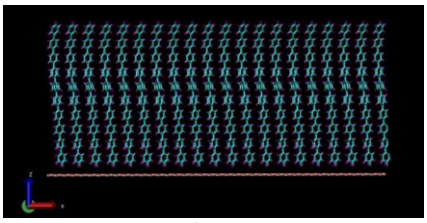


Figura 1. Posições iniciais do polímero PPP com o grafeno.

Cada simulação consistiu em duas etapas, a primeira estabilização dos polímeros a uma temperatura de 300k e pressão de 1 atmosfera utilizando o ensamble NPT com acoplamento da pressão anisobárica e a segunda etapa obtenção de dados utilizando o ensamble NVT, onde calculamos os perfis de densidade e as componentes diagonais do tensor pressão para o cálculo da tensão interfacial.

Para o cálculo da função distribuição radial de pares e visualização dos sistemas utilizamos o pacote *VMD*.

Resultados e Discussão

Com a adição do grafeno/oxido de grafeno vemos uma grande diferença na organização dos polímeros quando comparamos os perfis de densidade para ambos os sistemas (figura 2).

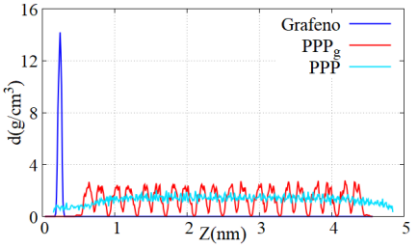


Figura 2. Perfis de densidade dos sistemas grafeno-PPP e PPP.

A principal parte deste trabalho foi o cálculo da molhabilidade dos polímeros com as superfícies de grafeno e oxido de grafeno através do cálculo da tensão interfacial, no qual um menor valor em indica uma maior afinidade entre as moléculas.

Tabela 1. Tensão interfacial γ para os sistemas PPP.

Temperatura(k)	PPP_G (10^{-3} N/m)	PPP_{OG} (10^{-3} N/m)
300	1513.9	481.75
350	1505.1	427.86
400	1311.0	177.20

Conclusão ou Conclusões

De maneira geral os polímeros apresentam um maior grau de organização quando juntos a uma superfície de grafeno/oxido de grafeno e também apresentam uma maior afinidade ao oxido de grafeno.

Agradecimentos

Agradecemos a Fundação Araucária pelo apoio financeiro a este projeto.

[1] Singleton, J.; Ferry, D. K. Graphene Rev J. Phys.: Condens. Matter, v. 21, n. 34, 2009.

[2]Zhao, L.; Lin, S.; Mendenhall, J. D.; Yuet, P. K.; Blankschtein D. Molecular Dynamics Investigation of the Various Atomic Force Contributions to the Interfacial Tension at the Supercritical CO_2-Water Interface Rev J. Phys. Chem v. 115, p. 6076-6087, 2011.