



48ª
Reunião Anual da
Sociedade
Brasileira de
Química

Emergências Climáticas?
A Química Age e Reage!

ANAIS

08 a 11 de junho de 2025, Campinas, Expo Dom Pedro

SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA

Anais da 48^a Reunião Anual da SBQ



**48^a
Reunião Anual da
Sociedade
Brasileira de
Química**

Campinas-SP
2025

Copyright © 2025 para os autores

Revisão textual e gramatical: Resposanbilidade dos respectivos autores.

Todos os direitos reservados 2025

A reprodução não autorizada desta publicação, no todo ou em parte,
constitui violação de direitos autorais (Lei 9.610/98).

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(Câmara Brasileira do Livro, SP, Brasil)

Reunião Anual da SBQ (48. : 2025 : Campinas, SP)
Anais da 48ª Reunião Anual da SBQ [livro
eletrônico] / Sociedade Brasileira de Química. --
1. ed. -- Campinas, SP : Apor Software, 2025.
PDF

Vários autores.
Vários colaboradores.
Bibliografia.
ISBN 978-85-63273-70-3

1. Química I. Sociedade Brasileira de Química.
II. Título.

25-282696

CDD-540

Índices para catálogo sistemático:

1. Química 540

Eliete Marques da Silva - Bibliotecária - CRB-8/9380

Área: FIS

Estudo da estabilização de nanotubos de carbono por líquidos iônicos atuando como surfactantes em meio aquoso e como solventes puros

Ana Yumi Oliozi Kanegawa (IC)¹, Kalil Bernardino (PQ)².

okanayumi1@usp.br; kalilb@ufscar.br

¹Instituto de Química de São Carlos, USP; ²Departamento de Química, UFScar.

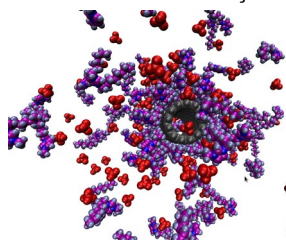
Palavras Chave: Química computacional, dinâmica molecular, líquidos iônicos, nanotubos de carbono.

Highlights

Study of the stabilization of carbon nanotubes by ionic liquids as surfactants in aqueous media and as pure solvents. Surface Active Ionic Liquids (SAILs) behave as surfactants in water. Three SAILs were studied by M. D. simulations. Preferential adsorption of the cation on the surface of nanotubes was observed.

Resumo/Abstract

Desde a descoberta dos nanotubos de carbono, houve um grande esforço de pesquisa em diversas áreas das ciências de materiais, uma vez que estes possuem propriedades mecânicas notáveis, como alta resistência à tração e módulo de elasticidade, além de excelente flexibilidade, condutividades térmicas e elétricas e baixos limiares de percolação. Os principais desafios para a integração dos nanotubos de carbono incluem a dispersão uniforme e a produção em massa de material de alta pureza a baixos custos. Este projeto foca na dispersão uniforme, essencial para diversas aplicações como o desenvolvimento de materiais de alto desempenho, sensores e dispositivos eletrônicos. Atualmente, os métodos químicos utilizados para dispersar os nanotubos de carbono empregam surfactantes ou solventes que alteram a energia de superfície dos nanotubos, melhorando a molhabilidade, adesão, além de aumentar a estabilidade da dispersão. Com o foco em tecnologias sustentáveis, os líquidos iônicos surgiram como solventes verdes promissores devido às suas propriedades únicas de caráter anfílico, e baixo ponto de fusão, embora muitas vezes sejam muito viscosos ou caros. No entanto, pequenas quantidades de líquidos iônicos em combinação com água podem superar esses desafios. Líquidos iônicos de caráter anfílico são denominados SAILs (*Surface Active Ionic Liquids*) e se comportam como surfactantes em fase aquosa. Os mesmos podem ser adsorvidos na superfície dos nanotubos resultando na formação de dupla camada elétrica capaz de estabilizá-los em dispersão. Para melhor compreender esse efeito, realizamos simulações de dinâmica molecular através do programa GROMACS para avaliar a adsorção espontânea de 3 SAILs contendo o cátion 1-octil-3-metilimidazólio e variando o ânion entre tetrafluoroborato, diacnamida e bistriflimida ao redor de um nanotubo de carbono de parede simples. Observou-se que o cátion foi adsorvido preferencialmente na superfície do nanotubo devido à sua cadeia alquílica hidrofóbica (Figura 1), enquanto a natureza da interação entre cátion e ânion regulará a carga efetiva do nanotubo e a intensidade da segregação de domínios. Nota-se que cada SAIL apresenta uma natureza de interação diferente, devido às forças interativas de cátion e ânion divergentes para cada líquido iônico.



As simulações permitem determinar a energia de interação de cada íon com o nanotubo, a área de superfície do mesmo recoberta pelos íons e o decaimento das concentração de cátions e ânions com a distância dos mesmos, efeitos cruciais para compreender como diferentes SAILs estabilizam nanotubos em dispersão.

Figura 1- Estrutura final da simulação de um nanotubo de carbono recoberto pelo SAIL tetrafluoroborato de 1-octil-3-metilimidazólio em meio aquoso

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecemos à FAPESP pela bolsa e apoio financeiro (processos 2024/17078-7 e 2023/09350-6) e ao LNCC/MCTI pelo uso do supercomputador SDumont.