

**MODELAGEM MATEMÁTICA DE NANOTUBOS DE CARBONO CURVADOS SOB
CAMPOS TERMOMAGNÉTICOS**

Fábio Scortegagna Ramos, Dr. César Manchein

INTRODUÇÃO

Os nanotubos de carbono podem ser pensados como folhas de grafeno (grades hexagonais planas de átomos de carbono) enroladas em forma de tubos de 1 a 3 nm de diâmetro, podendo acumular camadas com diâmetros cada vez maiores, chegando à ordem de 100 nm (ATKINS, P. W.; JONES, L, 2010). Estas estruturas possuem propriedades marcantes, como a alta resistência à deformação, alta flexibilidade, grande área superficial, piezoresistividade e podem apresentar alta condutância devido a perturbações mecânicas e contato com outros compostos químicos, possibilitando diversas aplicações, especialmente em sensores de massa e vibrações de estruturas (SHOUKAT, R.; KHAN, M. I, 2021). Em particular, a dinâmica individual de um nanotubo carbono é relevante quando usado em sensores de massa nanoressonadores, capazes de aferir massas de partículas com uma resolução da ordem de algumas dezenas de prótons e, portanto, altamente sensíveis (SHI, J. X.; LEI, X. W.; NATSUKI, T, 2021). Nesta aplicação, fatores externos inevitáveis podem diminuir a precisão das medidas, incluindo a temperatura e campos magnéticos, que podem influenciar a estabilidade das oscilações dos nanotubos e causar regimes caóticos, fenômeno que ainda há de ser estudado nesta década com a grande variedade de modelos existentes, a fim de melhor compreender o comportamento complexo da dinâmica real (ASKARI, H.; ESMAILZADEH, E, 2014). Diante disso, os objetivos deste trabalho são deduzir um modelo matemático para a situação discutida considerando os efeitos dos campos termomagnéticos e estudar o modelo com métodos analíticos para determinar a estabilidade linear do sistema e métodos numéricos para detectar a existência de caoticidade.

DESENVOLVIMENTO

Modelamos os nanotubos como vigas viscoelásticas nanométricas de seção transversal anular sujeitas a um forçamento transversal senoidal e campos térmicos e magnéticos longitudinais. Para isto, usamos as teorias de vigas Euler-Bernoulli e não localidade em corpos contínuos de Eringen para incluir efeitos de nanoscalas (WANG, Y. Z.; LI, F. M., 2014). Derivamos a equação de movimento usando o princípio de Hamilton e transformamos a equação diferencial parcial obtida numa equação diferencial ordinária, considerando o primeiro modo normal de oscilação (o mais relevante) e aplicando o método de Galerkin para a condição de contorno de extremidades simplesmente encostadas (AZARBONI, H. R., 2019). Realizamos uma análise de estabilidade linear (STROGATZ, S. H., 2024) do sistema sem forçamento externo para classificar os pontos de equilíbrio no retrato de fases e calculamos os espectros de Lyapunov (WOLF et al, 1985) para o sistema perturbado.

RESULTADOS

Encontramos a seguinte equação diferencial ordinária não linear adimensionalizada:

$$\frac{d^2 y}{d \chi^2} + b \frac{dy}{d \chi} + y + a y^3 = f \cos(\omega \chi).$$

Nela, y é a deflexão do nanotubo, χ é o tempo, a é a não linearidade geométrica, b é a

dissipação, f é a amplitude e ω a frequência angular do forçamento. Para f nulo, a origem do retrato de fases é uma espiral estável para $0 < b < 2$, um nó degenerado para $b=2$ um nó estável para $b > 2$. No caso forçado, obtivemos com o diagrama de Lyapunov (Figura 1) de b por f o delineamento das regiões caóticas do espaço de parâmetros, isto é, com o maior expoente de Lyapunov (λ_1) maior que zero. Adotamos $(a, \omega, y(0), \frac{dy(0)}{d\chi}, \chi_{\text{transiente}}, \Delta\chi) = (6.0, 2.0, -0.1, 0.5, 10^6, 10^{-2})$, ou seja, os parâmetros fixos, as condições iniciais, o tempo transiente e o passo de integração.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Em vista das aplicações mencionadas, os resultados analíticos e numéricos são relevantes e contribuirão para a literatura quando publicados. No entanto, ainda há diversas perspectivas para estudos futuros, como o acoplamento de nanotubos, a inserção de ruído e amortecimento cúbico, por exemplo, ainda pouco discutidos e que podem viabilizar ainda mais as aplicações dos nanotubos de carbono.

Palavras-chave: nanotubos de carbono; nanoressonadores; Caos; campos termomagnéticos.

ILUSTRAÇÕES

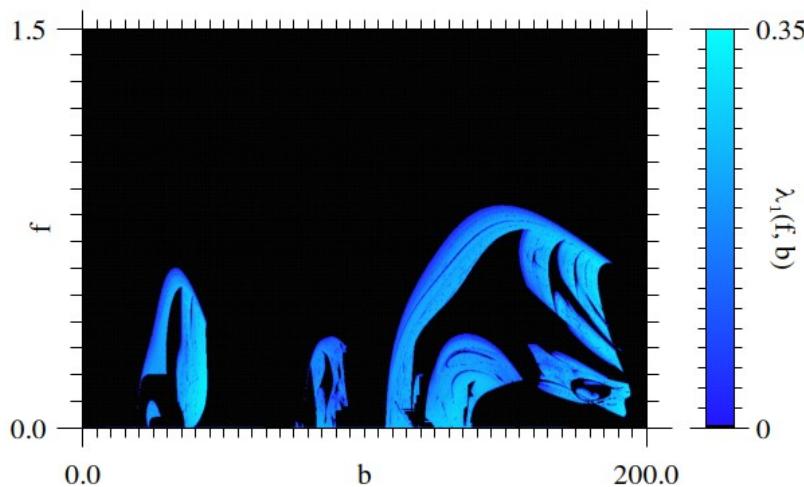


Figura 1. Diagrama de Lyapunov.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ASKARI, H.; ESMAILZADEH, E. Chaotic and periodic vibration of a carbon nanotube supported by nonlinear foundation. New York: IEEE, 2014. p. 632–635.

ATKINS, P. W.; JONES, L. **Chemical principles: the quest for insight**. 5. ed. New York: W. H. Freeman, 2010.

AZARBONI, H. R. Magneto-thermal primary frequency response analysis of carbon nanotube considering surface effect under different boundary conditions. **Composites Part B: Engineering**, v. 165, p. 435-441, 2019.

SHI, J. X.; LEI, X. W.; NATSUKI, T. Review on Carbon Nanomaterials-Based Nano-Mass and Nano-Force Sensors by Theoretical Analysis of Vibration Behavior. **Sensors**, v. 21, n. 5, p. 1907, 9 mar. 2021.

SHOUKAT, R.; KHAN, M. I. Carbon nanotubes: a review on properties, synthesis methods and applications in micro and nanotechnology. **Microsystem Technologies**, [S.I.], v. 27, p. 4183-4192, 2021.

STROGATZ, Steven H. **Nonlinear dynamics and chaos**: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering. 3. ed. Boca Raton: Chapman and Hall/CRC, 2024.

WANG, Y.-Z.; LI, F.-M. Nonlinear primary resonance of nano beam with axial initial load by nonlocal continuum theory. **International Journal of Non-Linear Mechanics**, v. 61, p. 74-79, 2014.

WOLF, Alan; SWIFT, Jack B.; SWINNEY, Harry L.; VASTANO, John A. Determining Lyapunov exponents from a time series. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, [S. l.], v. 16, n. 3, p. 285-317, 1985.

DADOS CADASTRAIS

BOLSISTA: Fábio Scortegagna Ramos.

MODALIDADE DE BOLSA: PIBIC/CNPq.

VIGÊNCIA: 09/2024 a 08/2025 – Total: 12 meses.

ORIENTADOR(A): Dr. César Manchein.

CENTRO DE ENSINO: CCT.

DEPARTAMENTO: Departamento de Física.

ÁREAS DE CONHECIMENTO: Ciências Exatas e da Terra/Física.

TÍTULO DO PROJETO DE PESQUISA: Sistemas Dinâmicos Não-Lineares: Propriedades Caóticas e Estatísticas – Parte 3.

Nº PROTOCOLO DO PROJETO DE PESQUISA: NPP3204-2024.