

---

# **NANOCIÊNCIA E NANOTECNOLOGIA:**

**Compósitos Termofixos Reforçados  
com Nanotubos de Carbono**

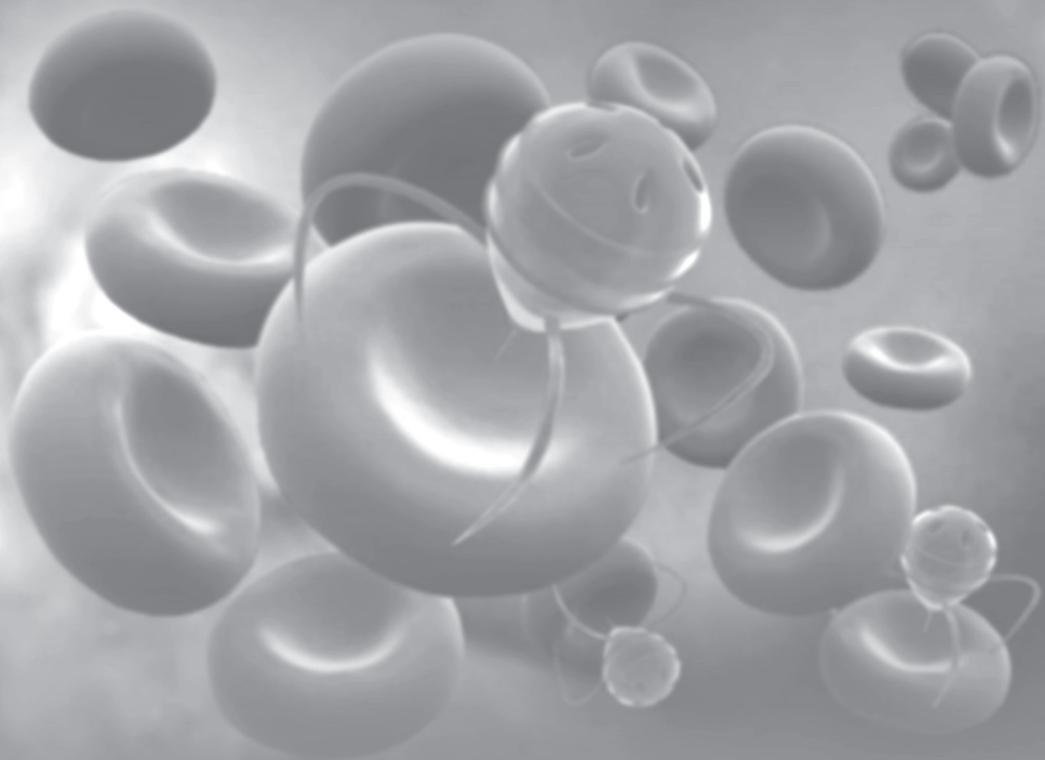


**Marcio Rodrigo Loos**

---

# **NANOCIÊNCIA E NANOTECNOLOGIA:**

**Compósitos Termofixos Reforçados  
com Nanotubos de Carbono**



EDITORA INTERCIÊNCIA

Rio de Janeiro – 2014

Copyright © 2014, by Marcio Rodrigo Loos

Direitos Reservados em 2014 por **Editora Interciência Ltda.**

**Diagramação:** Wilma Gesta de Andrade Lima

**Revisão Ortográfica:** Carlos Alexandre Fernandez  
Maria Helena de Aguiar Huebra

**Capa:** Rejane Megale Figueiredo

**Imagem da Capa:** Gustavo R. de Rezende

**CIP-Brasil. Catalogação-na-Fonte**  
**Sindicato Nacional dos Editores de Livros, RJ**

---

L848n

Loos, Marcio Rodrigo

Nanociência e nanotecnologia: compósitos termofixos reforçados com nanotubos de carbono / Marcio Rodrigo Loos. – [1. ed.] – Rio de Janeiro: Interciência, 2014. 300 p.: il.; 25 cm.

Apêndice

Inclui bibliografia

ISBN 978-85-7193-319-4

1. Nanociência. 2. Nanotecnologia. 3. Engenharia. I. Título.

13-06028

CDD: 620.5

CDU: 620.5

---

É proibida a reprodução total ou parcial, por quaisquer meios,  
sem autorização por escrito da editora.

[www.editorainterciencia.com.br](http://www.editorainterciencia.com.br)



**Editora Interciência Ltda.**

Rua Verna Magalhães, 66 – Engenho Novo

Rio de Janeiro – RJ – 20710-290

Tels.: (21) 2581-9378 / 2241-6916 – Fax: (21) 2501-4760

*e-mail:* vendas@editorainterciencia.com.br

Impresso no Brasil – *Printed in Brazil*

*Para minha esposa Cristimari e Baby, por sua dedicação,  
paciência e suporte.*



---

# Agradecimentos

Escrever um livro é uma tarefa difícil que demanda muito tempo e dedicação. Ao mesmo tempo a possibilidade de poder contribuir para o avanço da educação no país torna essa tarefa prazerosa, satisfatória e gratificante. O projeto de escrever este livro estendeu-se por mais de três anos. Diversas pessoas contribuíram em específicas partes do livro através do fornecimento de dados, imagens e fotos; esses agradecimentos se estendem ao Prof. Dr. Chad A. Mirkin, Jim Patterson e Glenn Craig. Agradeço a ajuda de Thiago F. C. C. Borges pela revisão parcial do livro. A revisão final do livro se deve ao Professor Dr. Sebastião Canevarolo ao qual agradeço imensamente pelas numerosas e valiosas sugestões. Um especial obrigado a Gustavo R. de Rezende pelo excelente trabalho de formatação e edição de grande parte das imagens apresentadas neste livro. Finalmente, sou muito grato a Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Ica Manas-Zloczower pelas enriquecedoras discussões sobre o formato/conteúdo do livro e diversas sugestões.

*Marcio R. Loos*  
Cleveland  
Fevereiro 2012



---

## Sobre o Autor



Dr. Marcio R. Loos tem uma experiência interdisciplinar em Física e Ciência e Engenharia de Materiais. Ele graduou-se em Física com distinção na Universidade do Estado de Santa Catarina em 2005 e em 2007 recebeu seu título de mestre em Ciência e Engenharia de Materiais na mesma instituição. Ele foi então para a Alemanha onde recebeu seu Ph.D. em Ciências Naturais pela Technische Universität Hamburg-Harburg em 2010. Na ocasião trabalhou com o Prof. Karl Schulte. No mesmo ano Dr. Loos iniciou seu pós-doutoramento na Case Western Reserve University nos Estados Unidos, colaborando com a Prof.<sup>a</sup> Ica Manas-Zloczower e o Prof. Donald L. Feke. Dr. Loos desenvolveu pesquisas em parceria com a Bayer Material Science no desenvolvimento de compósitos reforçados com NTC para a fabricação de turbinas para geradores eólicos. Atualmente é Professor no Departamento de Física da Universidade do Estado de Santa Catarina. Suas principais áreas de interesse incluem: compósitos de matriz polimérica reforçados com NTC, grafeno e nanofibras, síntese de novos polímeros de alta performance e simulações do comportamento mecânico de nanocompósitos.



---

# Prefácio

*Por que não podemos escrever os 24 volumes inteiros da Enciclopédia Britânica na cabeça de um alfinete?*

Esta pergunta, apresentada por Richard Feynman em 1959 durante uma palestra, pode ser considerada um dos marcos iniciais para a nanociência e nanotecnologia (N&N). O problema de manipular e controlar coisas em escala atômica foi então colocado em debate.

Desde então muitos desenvolvimentos tecnológicos aconteceram: o homem pisou na Lua, a válvula foi substituída por minúsculos transistores, e microscópios eletrônicos capazes de aumentar objetos em milhões de vezes foram inventados.

Em 1985 uma nova forma alotrópica do carbono, o fulereno, na qual os átomos estão ligados em um arranjo semelhante a uma bola de futebol foi descoberta por Richard Smalley, Robert Curl e Harry Kroto. Seis anos mais tarde Sumio Iijima publicou seu artigo sobre nanotubos de carbono (NTC) e depois disso o interesse da comunidade científica e indústrias no tópico N&N tem sido extraordinário. O número de publicações e patentes contemplando NTC e N&N cresce exponencialmente ano após ano. Nanotubos são 250 vezes mais resistentes do que o aço, e ainda têm a vantagem de ser 10 vezes mais leves! NTC são considerados ideais para reforçarem polímeros. A adição de pequenas quantidades de NTC tem o potencial de conferir condutividades térmica e elétrica a materiais isolantes.

Esta obra tem por objetivo suprir a carência de obras escritas em português no tema nanociência, nanotecnologia, nanotubos de carbono e compósitos contendo

NTC. Por se tratar de uma área nova, há uma escassa quantidade de livros didáticos sobre N&N disponíveis internacionalmente. Este livro foi escrito com uma linguagem simples e ao final de cada capítulo são apresentadas questões e problemas. Assim, este livro é uma ótima adição para cursos de graduação e pós-graduação nas áreas de Física, Química e Engenharias.

O livro foi dividido em seis capítulos e contempla diversos aspectos de N&N. O Capítulo 1 apresenta uma introdução ao mundo 'nano', explorando conceitos básicos como "o que torna a nanoescala importante?", o efeito do tamanho nas propriedades dos materiais, a evolução de N&N na história e aplicações envolvendo nanotecnologia. No Capítulo 2 uma base sólida sobre materiais compósitos é apresentada. A definição de compósitos, suas propriedades, matéria-prima para fabricação, vantagens e aplicações são discutidos com um enfoque em exemplos do cotidiano. O Capítulo 3 abrange uma extensa discussão sobre NTC. A partir de um enfoque histórico, apresenta-se a definição de NTC, sua estrutura, propriedades, métodos de produção, purificação, funcionalização e aplicações. No Capítulo 4 os fundamentos de compósitos de matriz polimérica contendo NTC são expostos. O potencial e limitações de NTC para o reforço e melhoria das condutividades térmica e elétrica de polímeros são discutidos com base em diversos modelos teóricos. O Capítulo 5 apresenta a tecnologia aplicada ao processamento de nanocompósitos de matriz polimérica, especificamente para a dispersão de NTC. A N&N no Brasil é tema do Capítulo 6. A posição do Brasil no cenário internacional de N&N é revelada. Produtos com base em nanotecnologia produzidos nacionalmente também são listados assim como áreas de competência de pesquisadores brasileiros e grupos de pesquisa em N&N.

*Marcio R. Loos*  
Cleveland  
Fevereiro 2012

---

# Lista de Figuras

1.1	Diferentes átomos alinhados em uma régua com comprimento de um nanômetro: 3,5 átomos de ouro, 4 átomos de ferro e 6,67 átomos de nitrogênio. Os átomos são considerados como esferas rígidas e o raio covalente é assumido . . . . .	3
1.2	Tamanho de objetos e organismos naturais em diferentes escalas. . .	4
1.3	Mudança da área superficial específica de um cubo de ouro através de sua miniaturização. . . . .	7
1.4	Variação da fração de átomos na superfície externa de um material como uma função do número de átomos. Figura adaptada de [1]. . .	9
1.5	Variação do ponto de fusão de partículas de ouro aglomeradas como uma função do raio [3] . . . . .	11
1.6	Átomos de Xénon posicionados em um substrato de níquel usando um microscópio de tunelamento. Figura utilizada com permissão da IBM Research, Almaden Research Center . . . . .	14
1.7	Relação entre ciência e tecnologia. Figura adaptada de [14]. . . . .	14
1.8	Formas “origami” criadas usando DNA através da fabricação botton-up. (a) estrela, (b) disco com três orifícios e (c) triângulo com domínios trapezoidais [20] . . . . .	16
1.9	A taça de Lycurgus. A taça parece verde quando iluminada por fora (a) e vermelho-púrpura quando iluminada por dentro (b). Figura gentilmente fornecida pelo <i>The British Museum</i> [21]. . . . .	17
1.10	Efeito de nanopartículas nas cores de vidrais. Figura adaptada de [24–26]. . . . .	19

1.11	Nanotecnologia no passado. Quadro “O Alquimista” de Pietro Longhi, 1661. Reproduzido de [31]. . . . .	20
1.12	Primeiro transistor inventado em 1947. Figura gentilmente fornecida pelo Bell Laboratories [35]. . . . .	23
1.13	Inventores do transistor [36]. . . . .	23
1.14	Adaptação da Lei de Moore mostrando a evolução do poder computacional. Figura utilizada com permissão da IBM Research, Almaden Research Center. . . . .	24
1.15	Número de transistores em um circuito integrado como função do ano. O número de transistores cresce exponencialmente e dobra a cada dois anos. Figura adaptada de [38]. . . . .	25
1.16	Representação do elevador espacial destinado a transportar carga da superfície da Terra para o espaço. Figura adaptada de [42] . . . .	26
1.17	Princípio de utilização de nanocápsulas para o tratamento de câncer. Figura gentilmente fornecida pelo National Cancer Institute (NCI) [50]. . . . .	28
1.18	Filme plástico (Durethan) contendo silicatos atua como barreira para oxigênio. Antes de atingir seu destino, as moléculas de O <sub>2</sub> precisam passar pelo longo caminho ao redor das nanopartículas [53] . . . . .	29
1.19	Monitor colorido flexível desenvolvido pela LG. Philips [57] . . . . .	31
1.20	Típico sistema de transmissão de um carro híbrido. Carros híbridos se tornam mais comuns a cada dia principalmente devido à sua redução da emissão de gás carbono [73]. . . . .	32
1.21	Princípio de funcionamento de um processo para dessalinização de água [79]. . . . .	33
1.22	Tecido antidodor fabricado a partir de nanopartículas de bambu [89] . . . . .	34
1.23	Diferentes partes de uma bicicleta fabricados com NTC: (a) garfo, (b) guidão e (c) roda da corrente [97] . . . . .	35
1.24	Nanoábaco criado por cientistas da IBM. O ábaco pode ser operado pela sonda de um microscópio de corrente de tunelamento. Figura reproduzida de [99] . . . . .	36
2.1	Fases de um material compósito. Figura adaptada de [110] . . . . .	50
2.2	Exemplos de materiais compósitos encontrados na natureza: (a) casca de um caracol, (b) dentes e (c) bambu e (d) madeira . . . . .	51
2.3	Um compósito é formado pela adição de fibras em uma resina. A propriedade final do compósito é uma combinação das propriedades da matriz e da fibra [111]. . . . .	53

2.4	Representação da propagação de falhas sendo interrompida: (a) compósito de fibras curtas e (b) compósito de fibras longas. Figura adaptada de [112]. . . . .	54
2.5	Classificação de materiais compósitos com base na matriz e com base na fase reforço . . . . .	55
2.6	Representação esquemática de compósitos reforçados com partículas (a) e com flocos (b) . . . . .	55
2.7	Representação esquemática de compósitos reforçados com fibras curtas preferencialmente orientadas (a) e aleatoriamente orientadas (b). . . . .	56
2.8	Representação esquemática de compósitos reforçados com fibras longas orientadas de forma unidirecional (a) e 3-D (b). . . . .	56
2.9	Representação esquemática de compósitos estruturais. Compósitos laminados (a) e painéis sanduíches (b). . . . .	57
2.10	Estrutura química idealizada de um típico poliéster . . . . .	59
2.11	Estrutura química do diglicidil éter de bisfenol A. . . . .	60
2.12	Estrutura química idealizada de um típico vinil éster com base em epóxi. . . . .	61
2.13	Fibras de vidro são comercializadas na forma de fibras contínuas em rolo (a), fibras curtas (b) e mantas (c) [113] . . . . .	64
2.14	Fibras de carbono longas (a), fibras curtas (b) e mantas (c) [114] . . . . .	64
2.15	Fibras aramida na forma de manga (a) e fitas (b) [115]. . . . .	65
2.16	Comparação entre as curvas tensão-deformação de diversas fibras e uma típica resina epóxi [111]. . . . .	66
2.17	Perfil de transferência de tensão da matriz para a fibra: (a) A resistência do compósito é elevada pelo aumento do comprimento da fibra (compósitos clássicos) e (b) A resistência do compósito é elevada pela diminuição do diâmetro da fibra (nanocompósitos) [116] . . . . .	70
2.18	Avião caça F-22A Raptor. Parte de sua estrutura (24 %) é feita de materiais compósitos. Figura reproduzida de [117] . . . . .	71
2.19	Super jumbo Airbus A380 com 20 % de compósitos [118] . . . . .	72
2.20	Boeing 787 Dreamliner com 50 % de compósitos [104]. . . . .	73
2.21	Mercedes CLK Cabriolet com carroceria polimérica reforçada com fibras de carbono. Figura reproduzida de [119]. . . . .	73
2.22	Enertia é uma moto elétrica com um quadro reforçado por fibras de carbono. Figura reproduzida de [120] . . . . .	74
2.23	Colete à prova de balas formado por fibras kevlar tramadas. Figura reproduzida de [121]. . . . .	75

2.24	Reforçamento de colunas de concreto através do uso de compósitos fibrosos. Figura reproduzida de [122] . . . . .	75
2.25	Ponte de plástico reforçada com fibras de carbono e de vidro na Dinamarca. Figura reproduzida de [123] . . . . .	75
2.26	Gerador eólico com pás fabricadas a partir de compósitos. Figura reproduzida de [124] . . . . .	76
2.27	Várias aplicações de diferentes biomateriais compósitos poliméricos [125]. . . . .	77
3.1	Estruturas alotrópicas do carbono: (a) Diamante, (b) Grafite e (c) Fulerenos. . . . .	82
3.2	Diagrama esquemático de um NTCPS (a), NTCPD (b) e NTCPM (c). Reproduzido de [135] . . . . .	83
3.3	Uma das primeiras micrografias retratando um NTCPS ou NTCPD. Figura reproduzida de [136]. . . . .	84
3.4	Microscopia eletrônica de transmissão de baixa resolução mostrando três fibras de carbono ocas. Magnificação de 20000X (reproduzido com permissão de [141]) . . . . .	85
3.5	Micrografias MET de três NTCPM consistindo de 5, 2 e 7 camadas concêntricas de grafeno (reproduzido com permissão de [133]). . . . .	85
3.6	Número de patentes e artigos publicados sobre nanotubos e nanotubos/ polímeros como uma função do ano (reproduzido de [143]). . . . .	86
3.7	Diagrama esquemático mostrando como uma folha de grafeno é 'enrolada' para formar um NTC. Figura adaptada de [14]. . . . .	87
3.8	Modelo esquemático de um nanotubo poltrona (a), zigue-zague (b) e quiral (c). Figura adaptada de [144] . . . . .	89
3.9	Imagens MEV mostrando: (a) fardo de NTC sob tensão aplicada pela sonda de um MFA, (b) zoom mostrando a ponta do NTC e a sonda do microscópio e (c) ruptura do fardo de NTC (reproduzido de [157]). . . . .	92
3.10	Um fardo idealizado de NTCPS (10, 10). Neste fardo os nanotubos individuais são mantidos juntos através de fortes ligações de empilhamento $\pi$ . Figura reproduzida de [168] . . . . .	95
3.11	Nanotubos semicondutores são representados por círculos vazios e condutores por estrelas. Figura adaptada de [14]. . . . .	96
3.12	(a) NTCPS após serem produzidos, contendo impurezas como partículas de ferro e carbono amorfo. (b) nanotubos de carbono após purificação em ácido clorídrico (HCl). Figura reproduzida de [187]. . . . .	99

3.13	Típicos defeitos em NTCPS: A) Anéis com 5 ou 7 átomos de carbono ao invés de 6, o que torna os NTC curvos; B) Defeitos $sp^3$ hibridizados (R = H e OH); C) Dano na estrutura dos NTC devido a condições oxidativas, causando a criação de um buraco e ligações a grupos -COOH; D) Extremidade do nanotubo aberta, ligada a grupos -COOH. Outros grupos químicos como -NO <sub>2</sub> , OH, H e = O são possíveis. Figura reproduzida de [168] . . . . .	100
3.14	Momentos críticos de um NTCPS sendo embrulhado por uma cadeia polimérica de polietileno. Durante a simulação uma das extremidades da macromolécula é colocada próxima à parede do NTC e a outra é afastada. O resultado mostra que a cadeia de PE se “contorce” e move na direção do NTC até que o equilíbrio seja alcançado. Figura reproduzida de [191] . . . . .	103
3.15	Ilustração dos modelos de adsorção. a) micela cilíndrica, vista de lado e de frente, b) hemimicela e c) adsorção randômica. Figura reproduzida de [196] . . . . .	104
3.16	Esquema ilustrando a interação de nanotubos com polímeros em bloco. . . . .	105
3.17	Ilustração de um nanotubo (10, 10) com 5 % de seus átomos de carbono funcionalizados com diferentes grupos químicos. Figura reproduzida de [191] . . . . .	106
3.18	Ilustração esquemática do método de arco de descarga. Figura adaptada de [200]. . . . .	107
3.19	Esquema do processo de ablação por laser. Figura adaptada de [225] . . . . .	108
3.20	Esquema do aparato usado para síntese de NTC via DQV. Figura adaptada de [227]. . . . .	109
3.21	Ilustração do crescimento de diferente estruturas via DQV. (a) Síntese de grafeno a 1 000 °C. (b) Síntese de NTC realizada a 900 °C na presença de gás metano e hidrogênio. No início da síntese um “meio” fulereno é formado na superfície do catalisador. Figura adaptada de [228]. Cortesia do <i>Minot Group, Oregon State University</i> . . . . .	110
3.22	Nanotubo sintetizado via DQV usando nanopartículas de Níquel como catalisador. O catalisador pode ser visto na extremidade do nanotubo. Figura reproduzida de [229] . . . . .	111
3.23	Esquema do reator utilizado para produção de nanotubos HiPco (Adaptado de [207]). . . . .	112

3.24	A imagem da esquerda é a referência e a da direita foi obtida 14 dias depois de injetar NTC no rato. A dose usada foi extremamente alta: 1 000 mg/kg do rato. As flechas indicam a adesão de NTC a órgãos e um filme cinza de células infiltradas por NTC. Figura reproduzida de [241] . . . . .	114
3.25	Típica caixa de luvas ( <i>glove box</i> ) usada para pesagem e transferência de nanotubos [243] . . . . .	115
3.26	Raquete de tênis fabricada com nanotubos de carbono [244]. . . . .	116
3.27	Tacos de hóquei produzidos com NTCPM [245] . . . . .	116
3.28	Taco de baseball da marca Easton fabricado com NTC [246]. . . . .	116
3.29	Bicicleta com quadro fabricado com NTC. O uso de NTC torna a bicicleta mais leve e com elevada resistência mecânica. [247] . . . . .	117
3.30	Barco à vela construído com fibras de carbono e nanotubos para reforçarem o mastro. [248] . . . . .	117
3.31	Tênis <i>adizero</i> da Adidas fabricado com nanotubos de carbono [250] . . . . .	118
3.32	Pás de turbina eólica fabricada com nanotubos de carbono [249] . . . . .	118
4.1	Ilustração esquemática da diferença entre dispersão e distribuição. Boa distribuição e pobre dispersão (a); Pobre distribuição e pobre dispersão (b); Pobre distribuição e boa dispersão (c); Boa distribuição e boa dispersão (d). Figura: cortesia Prof. <sup>a</sup> Ica Manas-Zloczower, Case Western Reserve University . . . . .	125
4.2	Resultados de simulação molecular ilustrando ligações químicas entre nanotubos e matriz: matriz cristalina (a,c) e matriz amorfa (b). Figura reproduzida de [253] . . . . .	126
4.3	Efeito do diâmetro externo de NTCPs na resistência à tensão de cisalhamento interfacial, $\tau_{NTC}$ , de acordo com equações 4.1 e 4.2. Simulações realizadas considerando (i) $\sigma_{NTC} = 50$ GPa; (ii) espessura da parede de NTCPs = $(d-d_i)/2 = 0,34$ nm . . . . .	129
4.4	Efeito do diâmetro externo na densidade de NTCPs e NTCPM de acordo com a equação 4.7. Simulações realizadas considerando (i) NTCPs com $d_i$ mínimo de 0,82 nm e $d$ máximo de 10 nm; (ii) espessura da parede de NTCPs = $(d - d_i)/2 = 0,34$ nm; (iii) NTCPM com $d_i$ mínimo de 2,1 nm e $d$ máximo de 60 nm . . . . .	132
4.5	Comparação entre o modelo de Einstein e Guth. Para simulações considerou-se uma matriz polimérica de módulo igual a 1 GPa. . . . .	134
4.6	Efeito da razão de aspecto de partículas no módulo de Young de um compósito de acordo com o modelo de Guth modificado (equação 4.11). Para simulações considerou-se uma matriz polimérica de módulo igual a 1 GPa . . . . .	135

4.7	Possíveis arranjos das duas fases em um compósito: (a) paralelo e (b) série . . . . .	136
4.8	Efeito da adição de NTC no módulo de Young de um compósito de matriz epóxi de acordo com os modelos em série e em paralelo. As simulações foram conduzidas considerando-se epóxi e nanotubos com módulo de Young de 3 e 1 000 GPa, respectivamente. . . . .	137
4.9	Variação do fator de eficiência $\eta_1$ como uma função da razão de aspecto de NTC. As simulações foram conduzidas considerando-se um compósito de matriz epóxi ( $E_m = 3$ GPa) reforçado com 10 %v/v de NTC ( $E_f = 1\ 000$ GPa). . . . .	138
4.10	Efeito da adição de NTC no módulo de Young de um compósito de matriz epóxi de acordo com o modelo de Cox. São mostradas as curvas para um compósito com NTC alinhados e NTC com distribuição randômica. As simulações foram conduzidas considerando-se $E_m = 3$ GPa, $E_f = 1\ 000$ GPa, $l = 10\ \mu\text{m}$ e $d = 15\ \text{nm}$ . . . . .	139
4.11	Módulo de Young de um compósito epóxi/NTC de acordo com o modelo de Halpin-Tsai. São mostradas as curvas para o módulo longitudinal e transversal de um compósito com NTC alinhados e NTC com distribuição randômica. As simulações foram conduzidas considerando-se $E_m = 3$ GPa, $E_f = 1\ 000$ GPa, $l = 10\ \mu\text{m}$ e $d = 15\ \text{nm}$ . . . . .	141
4.12	Módulo de Young de um compósito epóxi/NTC de acordo com o modelo de Halpin-Tsai. Os NTC estão em uma distribuição aleatória. As simulações foram conduzidas considerando-se $E_m = 3$ GPa e $E_f = 1\ 000$ GPa . . . . .	143
4.13	Módulo de Young de um compósito epóxi/NTC de acordo com o modelo de Nielsen. São mostradas as curvas para o módulo de um compósito com NTC alinhados e NTC com distribuição aleatória. O valor de $\psi$ foi calculado usando a equação 4.29 e equação 4.30 (Alternativo). As simulações foram conduzidas considerando-se $E_m = 3$ GPa, $E_f = 1\ 000$ GPa, $l = 10\ \mu\text{m}$ e $d = 15\ \text{nm}$ . Para NTC alinhados $A = 2\ l/d$ e $\phi_{\text{max}} = 0,82$ . Para NTC em distribuição aleatória $A = 8,38$ e $\phi_{\text{max}} = 0,52$ . . . . .	145
4.14	Resistência máxima de compósitos com NTC de diferentes comprimentos. São mostradas as curvas para compósitos onde, $l \gg 10\ l_c$ , $l > l_c$ e $l < l_c$ . As simulações foram conduzidas considerando-se $\sigma_m = 60$ MPa, $\sigma_{\text{NTC}} = 50$ GPa, $l_c = 5,33\ \mu\text{m}$ , $d = 16\ \text{nm}$ e $\tau_{\text{NTC}} = 150$ MPa. . .	147
4.15	Esquema de um nanotubo (a) e fibra efetiva (b) usado para modelar as propriedades elásticas de um nanotubo embutido em	

	um compósito. $F$ é a força externa aplicada, $d$ é o diâmetro da fibra, $(d-d_i) = t$ é a espessura da parede e $l$ é o comprimento da fibra. Figura adaptada de [261] . . . . .	149
<b>4.16</b>	Módulo de Young de um compósito reforçado com NTC aleatoriamente distribuídos de acordo com o modelo de Halpin-Tsai e Halpin-Tsai modificado. Simulações conduzidas considerando-se $E_m = 3$ GPa, $E_f = 1\ 000$ GPa, $l = 10\ \mu\text{m}$ e $d = 15\ \text{nm}$ . . . . .	153
<b>4.17</b>	Condutividade térmica de um compósito polimérico contendo NTC de acordo com o modelo em série, paralelo e uma média de ambos. As simulações foram realizadas considerando-se $\kappa_m = 0,18\ \text{W/m K}$ e $\kappa_f = 1\ 000\ \text{W/m K}$ . . . . .	157
<b>4.18</b>	Condutividade térmica de um compósito polimérico contendo NTC de acordo com o modelo geométrico. A condutividade térmica dos NTC foi variada entre $250\ \text{W/m K}$ e $1\ 000\ \text{W/m K}$ . Assumiu-se $\kappa_m = 0,18\ \text{W/m K}$ . . . . .	158
<b>4.19</b>	Condutividade térmica de acordo com o modelo de Nan. A condutividade térmica dos NTC foi variada entre $250\ \text{W/m K}$ e $1\ 000\ \text{W/m K}$ . Assumiu-se $\kappa_m = 0,18\ \text{W/m K}$ . . . . .	161
<b>4.20</b>	Condutividade térmica de acordo com o modelo de Hatta. As simulações foram conduzidas considerando-se $\kappa_m = 0,18\ \text{W/m K}$ , $\kappa_f = 250\ \text{W/m K}$ - $1\ 000\ \text{W/m K}$ , $l = 10\ \mu\text{m}$ e $d = 15\ \text{nm}$ . . . . .	162
<b>4.21</b>	Condutividade térmica de um compósito com NTC alinhados de acordo com o modelo de Nielsen. As simulações foram conduzidas considerando-se $\kappa_m = 0,18\ \text{W/m K}$ , $\kappa_f = 250\ \text{W/m K}$ - $1\ 000\ \text{W/m K}$ , $A = 2\ l/d$ , $\phi_{\text{max}} = 0,82$ , $l = 10\ \mu\text{m}$ e $d = 15\ \text{nm}$ . . . . .	164
<b>4.22</b>	Limiar de percolação como função da razão de aspecto para NTC . . . . .	166
<b>4.23</b>	(a) Dependência da condutividade elétrica de um compósito com a concentração de NTC e (b) Resistividade de um compósito com negro de fumo (esferas). Lembre que a condutividade $\sigma$ é definida como o inverso da resistividade $\rho$ . . . . .	167
<b>4.24</b>	Quadro esquemático mostrando o efeito de fillers 1D na condutividade de compósitos poliméricos. (a) Condutividade nula: dispersão e distribuição pobres. (b) Condutividade nula: distribuição homogênea, dispersão pobre. (c) Condutividade elevada: uma rede condutora de NTC é formada. (d) Condutividade nula: distribuição homogênea, dispersão pobre. Figura adaptada de [295]. . . . .	169
<b>5.1</b>	Possível rota para fabricação de um compósito. Após a síntese, os NTC podem ainda conter partículas do catalisador, as quais são	

	eliminadas através do processo de purificação. Em um próximo estágio, os NTC são oxidados e grupos carboxílicos podem ser criados nas extremidades dos nanotubos. Estes grupos podem servir como “âncora” para o crescimento de macromoléculas específicas (funcionalização) que podem interagir com um determinado polímero. Os NTC são então dispersos em uma matriz polimérica para obtenção de um compósito. Este último passo envolve a tecnologia de dispersão. Figura adaptada de [252] .....	179
<b>5.2</b>	Fluxograma apresentando os diferentes estágios do processo em solução de um compósito polimérico .....	180
<b>5.3</b>	Fluxograma apresentando os diferentes estágios do processo em fundido de um compósito polimérico .....	181
<b>5.4</b>	Fluxograma apresentando os diferentes estágios do processo em reação de um compósito polimérico .....	181
<b>5.5</b>	Uma barra de agitação misturando uma solução em um agitador magnético com aquecimento acoplado [301] .....	182
<b>5.6</b>	Típicas barras de agitação com diferentes tamanhos e formas [302] .....	183
<b>5.7</b>	Agitador mecânico e diferentes tipos de pás [303] .....	184
<b>5.8</b>	(a) Misturador de alto cisalhamento Ross Series 700 e (b) Diferentes tipos de rotores para criação de elevado cisalhamento [304] .....	185
<b>5.9</b>	Banho ultrassônico (a) e sonda ultrassom (b) [306] .....	187
<b>5.10</b>	Ocorrência de cavitação durante o processo de sonicação (a) e diferentes tipos de sondas (b) [306, 307] .....	188
<b>5.11</b>	Imagens de microscopia do processo de moagem de carbonato de sódio ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ) em isopropanol [308] .....	189
<b>5.12</b>	Típica centrífuga assimétrica dual usada em laboratórios para amostras de até 150 g. DAC com a tampa aberta (a) e vista da câmara de rotação (b) [309] .....	190
<b>5.13</b>	Desenho esquemático do princípio de funcionamento de uma DAC [310] .....	191
<b>5.14</b>	Moinho de três rolos (calandra) utilizado em laboratórios [311] ..	192
<b>5.15</b>	Princípio de funcionamento de um moinho de três rolos [312] ...	193
<b>5.16</b>	Extrusora de rosca única [314] .....	194
<b>5.17</b>	Representação esquemática de uma extrusora de rosca única. Adaptado de [315] .....	194
<b>6.1</b>	Produção científica em N&N de vários países no período 2000–2010 .....	200

6.2	Mercado global de nanotecnologia por setor de atividade em 2007 [320] .....	201
6.3	Mercado global de nanotecnologia por setor de atividade previsto para 2012 [320] .....	202
6.4	Mercado global de nanomateriais no período 2004-2010 [320] .....	202
6.5	Mercado global de nanocompósitos, nanopartículas, nanoargilas e nanotubos no período 2005-2011 [320] .....	203
6.6	Evolução do número de artigos de pesquisadores brasileiros em N&N no período 2000-2010 .....	206
6.7	Competências brasileiras identificadas na base Web of Science no período 2000-2010. ....	207
6.8	Instituições brasileiras às quais os pesquisadores brasileiros em nanociência e nanotecnologia estão vinculados. Considerou-se o período 2000-2010. ....	208
6.9	Áreas de especialização dos artigos publicados por pesquisadores brasileiros em N&N no período 2000-2010. ....	209
6.10	Número de grupos de pesquisa em N&N por termo de busca. Dados referentes ao ano de 2012 .....	210
6.11	Distribuição geográfica dos grupos de pesquisa em N&N. Dados referentes ao ano de 2012 .....	210
6.12	Áreas de conhecimento declaradas pelos grupos de pesquisa em nanociência e nanotecnologia. Dados referentes ao ano de 2012 ..	211
6.13	Número de cursos em N&N oferecidos em diferentes países de acordo com [322]. Apenas países com um número mínimo de 5 cursos foram considerados .....	212

---

## Lista de Tabelas

1.1	Prefixos do Sistema Internacional de Unidades (SI) . . . . .	3
1.2	Variação da área, volume e razão área/volume para cubos com arestas de diferentes tamanhos . . . . .	8
1.3	Linha do tempo com eventos relevantes para N&N [33] . . . . .	21
2.1	Propriedades típicas de alguns materiais de engenharia . . . . .	43
2.2	Nome e estrutura da unidade repetitiva de diferentes polímeros [108] . . . . .	45
2.3	Uso de materiais compósitos em diferentes países nos anos de 1998 e 2005 [109] . . . . .	49
2.4	Vantagens/propriedades e desvantagens de diferentes resinas. . . . .	61
2.5	Propriedades típicas de fibras de carbono, vidro e aramida . . . . .	66
2.6	Vantagens/propriedades e desvantagens de compósitos . . . . .	68
3.1	Propriedades mecânicas de materiais. $\rho$ : Densidade; E: Módulo de Young; $\epsilon$ : Alongamento na ruptura; $\sigma_m$ : Resistência máxima. . . . .	93
3.2	Condutividade elétrica ( $\sigma$ ) de materiais. . . . .	97
3.3	Condutividade térmica ( $\kappa$ ) de materiais . . . . .	98
4.1	Propriedades mecânicas e densidade de polímeros [108] . . . . .	127
4.2	Notação usada para representar frações e concentrações de NTC. . . . .	130
4.3	Valores de A para o modelo de Nielsen [276] . . . . .	144
4.4	Valores para a fração de empacotamento máximo ( $\phi_{max}$ ) [276]. . . . .	145

4.5	Propriedades efetivas de diferentes NTC: somente as paredes externas suportam a carga .....	151
4.6	Propriedades efetivas de diferentes NTC: todas as paredes suportam a carga .....	152
4.7	Condutividade térmica ( $\kappa$ ) de polímeros [108] .....	154
6.1	Produtos de nanotecnologia desenvolvidos no Brasil [320] .....	204
6.2	Grupos de pesquisa em N&N no Brasil e suas áreas de especialização .....	214

---

# Sumário

Sobre o Autor .....	IX
Prefácio .....	XI
Lista de Figuras.....	XIII
Lista de Tabelas.....	XXIII
<b>1 NANOCIÊNCIA E NANOTECNOLOGIA (N&amp;N).....</b>	<b>1</b>
1.1 Introdução à Nanoescala.....	2
1.2 O Que Torna a Nanoescala Importante?.....	5
1.3 Propriedades de Nanopartículas e Efeito do Tamanho .....	10
1.3.1 Propriedades Morfológicas e Estruturais .....	11
1.3.2 Propriedades Térmicas.....	11
1.3.3 Propriedades Eletromagnéticas .....	12
1.3.4 Propriedades Ópticas .....	12
1.3.5 Propriedades Mecânicas .....	12
1.4 Nanociência e Nanotecnologia (N&N) .....	12
1.5 Nano na História .....	16
1.6 A Lei de Moore.....	22
1.7 Aplicações de Nanotecnologia .....	25
1.7.1 Espaço e Aviação.....	26
1.7.2 Medicina.....	27
1.7.3 Alimentação.....	28
1.7.4 Eletrônica.....	30
1.7.5 Energia .....	31

1.7.6	Poluição do Ar e Águas . . . . .	33
1.7.7	Têxteis . . . . .	34
1.7.8	Esportes . . . . .	35
1.8	Nanociência e Nanotecnologia: Um Olhar Para o Futuro . . . . .	35
<b>2</b>	<b>COMPÓSITOS . . . . .</b>	<b>41</b>
2.1	Materiais de Engenharia Convencionais . . . . .	42
2.1.1	Metais . . . . .	44
2.1.2	Polímeros . . . . .	44
2.1.3	Cerâmicas . . . . .	48
2.1.4	Compósitos . . . . .	48
2.2	O Conceito de Compósitos . . . . .	50
2.2.1	Funções do Reforço e da Matriz . . . . .	52
2.2.2	Classificação de Compósitos . . . . .	54
2.3	Matéria-Prima para Fabricação de Compósitos . . . . .	57
2.3.1	Resinas . . . . .	58
2.3.2	Reforços . . . . .	63
2.4	Vantagens e Desvantagens de Compósitos . . . . .	68
2.5	Influência do Comprimento de Fibras em Compósitos Fibrosos . . . . .	69
2.6	Aplicações de Compósitos . . . . .	70
<b>3</b>	<b>FORMAS ALOTRÓPICAS DO CARBONO E NANOTUBOS DE CARBONO . . . . .</b>	<b>79</b>
3.1	Formas Alotrópicas do Carbono . . . . .	80
3.2	Nanotubos de Carbono (NTC) . . . . .	82
3.2.1	História dos NTC . . . . .	83
3.2.2	Estrutura dos NTC . . . . .	86
3.2.3	Propriedades Mecânicas de NTC . . . . .	90
3.2.4	Propriedades de Transporte de NTC . . . . .	95
3.3	Tratamento de NTC . . . . .	98
3.3.1	Purificação e Oxidação de NTC . . . . .	98
3.3.2	Funcionalização Química de NTC . . . . .	102
3.4	Métodos de Produção de NTC . . . . .	107
3.4.1	Descarga de Arco . . . . .	107
3.4.2	Ablação por Laser . . . . .	108
3.4.3	Deposição Química de Vapor . . . . .	108
3.4.4	Conversão de Monóxido de Carbono à Alta Pressão . . . . .	111
3.4.5	Custo e Capacidade de Produção de NTC . . . . .	112
3.5	Riscos de NTC à saúde . . . . .	113
3.6	Aplicações de NTC . . . . .	115

<b>4</b>	<b>FUNDAMENTOS DE COMPÓSITOS DE MATRIZ POLIMÉRICA CONTENDO NTC</b> .....	<b>123</b>
4.1	Uso de NTC Para Melhoria das Propriedades de Polímeros ...	124
4.2	Propriedades Mecânicas de Compósitos Contendo NTC .....	126
4.2.1	A Equação de Einstein .....	133
4.2.2	O Modelo em Série e em Paralelo .....	135
4.2.3	Modelo de Cox .....	137
4.2.4	Modelo de Halpin-Tsai .....	139
4.2.5	Modelo de Nielsen .....	143
4.2.6	Resistência Máxima de Nanocompósitos .....	146
4.2.7	Propriedades Efetivas de NTC e o Modelo de Halpin-Tsai Modificado .....	148
4.3	Condutividade Térmica de Compósitos Contendo NTC .....	154
4.3.1	Modelo em Série e em Paralelo .....	156
4.3.2	Modelo Geométrico .....	157
4.3.3	Modelo de Nan .....	160
4.3.4	Modelo de Hatta .....	161
4.3.5	Modelo de Nielsen .....	162
4.4	Condutividade Elétrica de Compósitos Contendo NTC .....	164
<b>5</b>	<b>PROCESSAMENTO DE NANOCOMPÓSITOS DE MATRIZ POLIMÉRICA</b> .....	<b>177</b>
5.1	Processamento de Compósitos de Matriz Polimérica Contendo NTC .....	178
5.2	Tecnologia Aplicada ao Preparo de Nanocompósitos de Matriz Polimérica .....	182
5.2.1	Agitamento Magnético .....	182
5.2.2	Agitamento Mecânico .....	184
5.2.3	Misturador de Alto Cisalhamento .....	184
5.2.4	Sonicação .....	187
5.2.5	Centrifugação Assimétrica Dual .....	190
5.2.6	Moinho de Três Rolos (Calandra) .....	192
5.2.7	Extrusão .....	193
<b>6</b>	<b>NANOCIÊNCIA E NANOTECNOLOGIA (N&amp;N) NO BRASIL</b> .....	<b>197</b>
6.1	A Política Brasileira de Nanotecnologia .....	198
6.2	Produção Científica em N&N .....	198
6.3	Mercado de Nanotecnologia .....	200
6.3.1	Mercado de Nanotecnologia no Mundo .....	200

6.3.2 Mercado de Nanotecnologia no Brasil . . . . .	203
6.4 Nanociência e Nanotecnologia no Brasil . . . . .	206
6.5 Educação em N&N. . . . .	211
<b>A Transcrição da Palestra de Richard Feynman. . . . .</b>	<b>231</b>
<b>B Tabela Periódica dos elementos . . . . .</b>	<b>247</b>
<b>C Folha de Grafeno. . . . .</b>	<b>249</b>
<b>D Simulações Usando Matlab. . . . .</b>	<b>251</b>
<b>Soluções dos Problemas. . . . .</b>	<b>255</b>
<b>Referências . . . . .</b>	<b>259</b>