



### MpoMss06-002

#### **Determinação dos coeficientes elásticos de poliéter éter cetona (peek) a partir de cálculos de primeiros princípios por dinâmica molecular**

Di Benedetto, R.M.(1); Ancelotti Júnior, A.C.(1);

(1) UNIFEI;

A técnica de dinâmica molecular é capaz de avaliar os movimentos dos átomos em função do tempo e temperatura, conforme as solicitações externas e as condições de contorno do sistema molecular. Com base em teorias atomísticas, da termodinâmica e da mecânica clássica, as simulações de dinâmica molecular com potencial empírico auxiliam o desenvolvimento de novos materiais poliméricos, a otimização de propriedades dos polímeros e a caracterização desses materiais. Cálculos de primeiros princípios baseados na teoria do funcional da densidade (DFT) representam uma técnica sofisticada para investigar a resistência mecânica de materiais em geral, embora pouco explorada em estruturas poliméricas, como polímeros termoplásticos de alto desempenho. Neste estudo, cálculos de DFT foram realizados sistematicamente para avaliar os efeitos da deformação na estrutura da poliéter éter cetona (PEEK), determinando o módulo de elasticidade máximo em uma condição de perfeito alinhamento das cadeias poliméricas. As posições dos átomos e o arranjo das cadeias poliméricas foram definidos com base na energia total e nas minimizações de força de atração/repulsão. Quatro diferentes estruturas de menor energia foram estudadas na condição de estiramento, de até 10 Å por monômero. Os resultados revelaram um valor de módulo de elasticidade médio de  $5,93 \pm 0,74$  GPa, que pode ser atribuído ao limite superior para cadeias poliméricas perfeitamente alinhadas e esticadas, o que se apresenta compatível com valores empíricos.