

EXATAS E DA TERRA

DESENVOLVIMENTO COMPUTACIONAL APLICADO A SISTEMAS MAGNÉTICOS

Fernando David Céspedes Villalba

Estudante do Curso de Engenharia de Energias Renováveis
ILATIT– UNILA;

E-mail: fernando.villalba@aluno.unila.edu.br;

Rafael Otoniel Ribeiro Rodrigues da Cunha

Docente/pesquisador do curso Engenharia Física – ILACVN – UNILA.

E-mail: rafael.cunha@unila.edu.br.

1 Introdução

A evolução tecnológica dos últimos anos tem trazido um novo universo em termos de materiais, principalmente na área de sólidos nanoestruturados, onde os efeitos quânticos assumem um importante papel. Este plano de pesquisa tem como objetivo geral estudar o comportamento de sistemas macro e nanoscópicos. A proposta inicial deste trabalho era investigar importantes efeitos de sistemas magnéticos em diferentes estruturas, como filmes, multicamadas e nanoestruturas, através de modelagens computacionais.

Para o desenvolvimento do projeto de pesquisa foi tomado como elemento de estudo o níquel (Ni), devido a sua ampla gama de aplicações no universo tecnológico, por ser um material condutor, de baixo custo, muito utilizado em processos catalizadores, além de possuir propriedades magnéticas interessantes. No início do desenvolvimento deste trabalho, houve a oportunidade de utilizar o pó de níquel para fabricar nanopartículas de níquel, em caráter experimental, a fim de caracterizar e estudar as propriedades físicas e magnéticas.

O níquel nanométrico foi obtido a partir do processo de moagem. Estudado e analisado em condições de trabalho experimentalmente diferentes, tanto para o caso do meio em que foram moidas as amostras, como o tempo e a proporção com que passaram pelo processo de moagem. O objetivo da realização desse processo diferenciado para cada amostra foi a de otimizar o processo de produção e a qualidade do resultado obtido. O estudos para cada caso foram realizados e analisadas paralelamente. Após passarem pelo processo de moagem, as amostras de níquel são levadas ao Difratometro de Raio X onde são analisadas para verificar se cumprem com as dimensões nanométricas e finalmente é realizado a caracterização de cada amostra.

2 Metodologia

O níquel nanométrico foi obtido pelo processo de moagem de pó de níquel, utilizando um moinho de bolas Retsch P100 planetary mostrado na Figura 1. Utilizando um recipiente cilíndrico de aço, coloca-se o pó de níquel e esferas de aço de 10 mm de diâmetro, a uma proporção bola:pó de 20: 1, com velocidade constante de rotação de 400 rpm.

O processo de moagem foi realizado à temperatura ambiente por duas maneiras diferentes: uma seca e outra em meio úmido. Para a realização da moagem em meio úmido foi utilizado ciclohexano, como agente controlador reações químicas. Nas condições diferenciadas de moagem, ambas amostras formam moídas em tempos de moagem diferentes, com o objetivo de otimizar o processo de produção. Para ambas as condições, as amostras foram moídas por um período de 20, 30 e 40 horas.

Após passarem pelo processo de moagem, as amostras foram caracterizadas estruturalmente pelo difratômetro de Raio X (DRX) PANalytical, medindo com radiação Cu-K α , com o objetivo de verificar a formação das nanopartículas.

Figura 1: Moinho de bolas Retsch P100 planetary.



Fonte: Disponível em < <https://unila.edu.br/mestrado/fisica/labs>>.

3 Fundamentação teórica

O estudo de nanopartículas metálicas tornaram-se consideravelmente importante tanto na pesquisa básica quanto em pesquisa aplicada devido às suas propriedades físicas e químicas únicas que são modificadas em comparação com a estrutura massiva devido ao seu tamanho de grão pequeno e grande área de superfície [1]. Vários estudos foram realizados a fim de investigar as propriedades física e química, para obter as nanopartículas metálicas, tais como co-precipitação [2], hidrotérmica [3], a decomposição térmica dos compostos

organometálicos [4], electroquímicos [5], e a técnica de moagem por bolas [6-9]. O tamanho de partícula, forma e cristalinidade depende do método de síntese selecionado [10]. Neste sentido, a técnica de moagem com esferas é uma das amplamente utilizada para produzir nanopartículas metálicas, sendo o método viável para a produção de grande escala [11]. Entre a diversidade de nanopartículas metálicas, nanopartículas de níquel têm atraído muita atenção devido as suas aplicações magnética, de condução e catalíticas [12-15].

4 Resultados

O procedimento de moagem apresentou um resultado que revela a viabilidade da fabricação de nanopartículas de níquel. Os estudos e análises realizadas sobre cada amostra moída revelou uma relação entre o tempo e a dimensão da nanopartícula produzida: quando maior tempo de moagem e maior velocidade de giro do moinho, menor o diâmetro da nanopartícula de níquel.

Alem disso pode-se notar que a moagem em meio úmido apresenta um resultado otimizado em comparação com o procedimento em meio seco, pois na moagem seca apresentou oxidação e possível contaminação das amostras, pois nesta etapa utilizou-se NaCl como agente não aglutinante. Já na moagem umedecida com ciclohexano não apresenta reações ou alterações consideráveis nas amostras.

5 Conclusões

O método desenvolvido para a obtenção das nanopartículas de níquel demonstrou ser um método viável e eficiente, considerando o nível de complexidade e o custo de outros métodos e processos mais sofisticados. Além de demonstrar ser uma metodologia relativamente simples. Apesar do tempo de procedimento ser relativamente alto, essa técnica, existente na UNILA, viabiliza a fabricação de nanopartículas pulverizadas com boa eficiência e menor custo comparada a outras técnicas de fabricação de nanopartículas.

As caracterizações estruturais e magnéticas (não realizadas na UNILA) revelam que além de nanopartículas, existem formação de outras fases não nanométricas, bem como de aglomerados.

Uma recomendação para seguimento da pesquisa seria realizar o estudo do procedimento utilizando outro meio úmido e aplicando diferentes velocidades de rotação em tempo menor.

6 Principais referências bibliográficas

- [1] C. Petit, A. Taleb, M.P. Pileni, Self-Organization of Magnetic Nanosized Cobalt Particles, *Adv. Mater* 10 (1998) 259-261.
- [2] W.-C. Hsu, S.C. Chen, P.C. Kuo, C.T. Lie, W.S. Tsai, Preparation of NiCuZn ferrite nanoparticles from chemical co-precipitation method and the magnetic properties after sintering, *Mater. Sci. Eng.*, **A 111** (2004) 142–149.
- [3] R.M. Freire, T.S. Ribeiro, I.F. Vasconcelos, J.C. Denardin, E.B. Barros, M. Giuseppe, L. Carbone, S.E. Mazzetto, P.B.A. Fachine, MZnFe₂O₄ (M = Ni, Mn) cubic superparamagnetic nanoparticles obtained by hydrothermal synthesis, *J. Nanopart. Res.* **15** (2013) 1-12.
- [4] F. Alonso, P. Riente, J.A. Sirvent, M. Yus, Nickel nanoparticles in hydrogen-transfer reductions: Characterisation and nature of the catalyst, *Appl. Catal. A* **378** (2010) 42–51.
- [5] M. Aghazadeh, A.N. Golikand, M. Ghaemi, Synthesis, characterization, and electrochemical properties of ultrafine b-Ni(OH)₂ nanoparticles, *Int. J. Hydrogen Energy* **36** (2011) 8674-8679.
- [6] C.C. Koch, Y.S. Cho, Nanocrystals by high energy ball milling, *Nanostruct. Mater.* **1** (1992) 207-212.
- [7] C. Suryanarayana, C. Suryanarayana, Mechanical alloying and milling, *Prog. Mater. Sci.* **46** (2001) 1-184.
- [8] T. Tsuzuki, P.G. McCormick, Mechanochemical synthesis of nanoparticles, *J. Mater. Sci.* **39** (2004) 5143 – 5146.
- [9] J.F. de Carvalho, S.N. de Medeiros, M.A. Morales, A.L. Dantas, A.S. Carriço, Synthesis of magnetite nanoparticles by high energy ball milling *Appl. Surf. Sci.* **275** (2013) 84-87.
- [10] S. Sun, H. Zeng, Size-Controlled Synthesis of Magnetite Nanoparticles, *J. Am. Chem. Soc.* **124** (2002) 8204-8205
- [11] Y.S. Yoon, S.H. Jee, S.H. Lee, S.C. Nam, Nano Si-coated graphite composite anode synthesized by semi-mass production ball milling for lithium secondary batteries, *Surf. Coat. Technol.* **206** (2011) 553–558.
- [12] Q.A. Pankhurst, J. Connolly, S.K. Jones, J. Dobson, Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36** (2003) R167–R181.

[13] X. Zhou, Z. Chen, D. Yan, H. Lu, Deposition of Fe–Ni nanoparticles on polyethyleneimine-decorated graphene oxide and application in catalytic dehydrogenation of ammonia borane, *J.Mater.Chem.* **22** (2012) 13506–13516.

[14] S. Singamaneni, V.N. Bliznyuk, C. Binek, Y.T. Evgeny, Magnetic nanoparticles: recent advances in synthesis, self-assembly and applications, *J. Mater. Chem.* **21** (2011) 16819-16845.

[15] **X. Wu, W. Xing, L. Zhang, S. Zhuo, J. Zhuo, G. Wang, S. Qiao, Nickel nanoparticles prepared by hydrazine hydrate reduction and their application in supercapacitor, *Powder Technol.* **224** (2012) 162–167.**