

ESTUDOS DE DIFUSÃO ATÔMICA EM NANOPOROS METÁLICOS

J. P. A. MENDONÇA¹, M. G. MONTEIRO JUNIOR¹, F. SATO¹

jp Almeida@ice.ufjf.br

¹ *Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Física, Laboratório de Simulação Computacional*

Nanoporos são furos de dimensões nanoscópicas que podem se formar ou serem construídos em estruturas de diversos materiais. Afim de compreender melhor essas estruturas, realizamos um estudo de uma de suas principais propriedades: a energia de superfície. Energia de superfície é o ganho de energia potencial obtido na formação da superfície. Este valor está relacionado com diversos fenômenos como oxidação de materiais, crescimento de cristais, desempenho de catalisadores, entre outros.

Por meio do potencial TB-SMA (tight-binding second moment approximation), já altamente difundido, da otimização dos algoritmos de simulação tendo em vista a arquitetura de programação em paralelo CUDA das placas de vídeo da Nvidia e do desenvolvimento de um potente software capaz de criar modelos de nanoporos em diferentes aspectos de forma e estrutura, obtivemos resultados de cálculos em cristais metálicos de Au, Cu e Cu₃Au (todos de rede cristalina Cúbica de Face Centrada) da ordem de 30.000 átomos (5,0.10² nm³, aproximadamente), sendo estas modeladas em sete formas básicas com diferentes níveis de desgaste.

Os atuais resultados reafirmam a existência de uma constante que representa o ganho de energia de superfície ao removermos um átomo da superfície. O estudo de estruturas com efeito de desgaste ainda revelou um ganho de energia em relação às estruturas sem desgaste. Essas constatações ajudam a compreender o favorecimento de crescimento de cristais em dados formatos, o porquê de nanosuperfícies de determinados formatos se "oxidarem" com mais facilidade e a natureza dos processos que desgastam as estruturas nanoscópicas.

Palavras-chave: nanoporos, energia de superfície, TB-SMA

Referências

[1] F. Cleri and V. Rosato, *Phys. Rev. B* **48**, 22-33 (1993)

[2] Q. Pu, Y. Leng, L. Tsetseris, H. S. Park, S. T. Pantelides, P. T. Cummings, *J. Chem. Phys.* **126**, 144707 (2007)