

Área: Ciências Exatas e da Terra

Projeto: ESTUDOS DA FORMAÇÃO DE NANOFIOS E DO PROCESSO DE MEMÓRIA DEFORMA EM LIGAS METÁLICAS DE NITI

Autores: MAXWEL GAMA MONTEIRO JUNIOR (XXII PIBIC/XXVI BIC/UFJF); JOÃO PAULO ALMEIDA DE MENDONÇA; DOUGLAS MARTINS VIEIRA DA SILVA; PABLO ZIMMERMANN COURA; SIDINEY DE ANDRADE LEONEL; FERNANDO SATO (ORIENTADOR);

Resumo: Nanoestruturas metálicas são um importante alvo de estudos, devido ao seu potencial de aplicação em dispositivos tecnológicos, após a consolidação dos dispositivos semicondutores e da miniaturização de aparelhos. Em princípio, um dispositivo em escalas microscópicas ou até nanoscópicas necessita de minúsculos contatos e condutores, e as pesquisas atuam no sentido de desenvolver e aprimorar cada vez mais esses componentes. Nesse contexto, uma classe importante de estruturas são os nanofios, que podem ser um tarugo de dimensões na ordem de décimos de nanômetros, ou as chamadas cadeias lineares suspensas (LAC – Linear Atomic Chain). Efeitos como defeitos de empilhamento na rede cristalina e ganhos em energia de superfície são de interesse no estudo de nanofios. O estudo computacional de nanoestruturas metálicas, em qualquer metodologia, apresenta certas limitações, em particular o alto custo de processamento, especialmente para métodos quânticos de primeiros princípios, em contraste com o uso de metodologias baseadas em potenciais empíricos. Também se destacam condições de contorno periódicas artificiais, velocidades de puxamento adequadas para a formação de nanofios, e o problema de incorporar aspectos observados experimentalmente, como o fato de direções cristalográficas diferentes nos grãos formadores de nanofios de um material produzirem diferentes resultados. Para realizar esse estudo, desenvolvemos um código computacional baseado em dinâmica molecular usando o potencial tight-binding com aproximação de segundos momentos (TB-SMA). O código foi desenvolvido nas linguagens Fortran 90, C e C Cuda, em processadores paralelos de placas gráficas GPU. Estudamos a formação de nanofios a partir do processo de alongamento de estruturas, similar ao puxamento de barras metálicas, em dimensões nanométricas. São levados em conta a velocidade de alongamento, temperatura, direção cristalográfica do material e os elementos químicos presentes na estrutura para a formação do nanofio. Para os clusters da liga nitinol (NiTi), dentro do processo de formação de nanofios também se evidenciaram muitos fenômenos de transições entre as fases do cristal, que caracterizam a memória de forma dessa liga, e não podem ser desassociados do estudo.