



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Fusão e solidificação de nanopartículas de Al por dinâmica molecular
Autor	AMANDA GOLDANI RODRIGUES PEIXOTO
Orientador	GUSTAVO DE MEDEIROS AZEVEDO

Fusão e solidificação de nanopartículas de Al por dinâmica molecular

Autora: Amanda Goldani Rodrigues Peixoto

Orientador: Gustavo de Medeiros Azevedo

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Nanopartículas costumam apresentar características físicas distintas daquelas observadas macroscopicamente. Por exemplo, à medida que se reduzem as dimensões, em consequência do aumento da razão área-volume e maior predominância das propriedades superficiais, o ponto de fusão torna-se uma propriedade dependente do tamanho da partícula. Devido a isso, em nanopartículas, além de observar-se uma coexistência dinâmica das fases líquida e sólida durante o processo de derretimento, este costuma ocorrer em temperaturas inferiores às comumente observadas no *bulk*. Sendo assim, o presente estudo tem como objetivo (1) analisar o efeito do aumento/redução da razão área-volume na determinação do ponto de fusão de nanopartículas de alumínio compostas por um número variável de átomos e (2) como se dá a convergência para a temperatura de derretimento observada no *bulk* a partir da caracterização da fusão como função do tamanho (quantidade de átomos). É importante destacar que a escolha do alumínio como elemento de análise deve-se à sua relativa simplicidade e à existência de uma grande quantidade de dados experimentais disponíveis na literatura. Trata-se, portanto, de um sistema modelo para estudos computacionais. Por conseguinte, têm-se como metodologia a realização de simulações de dinâmica molecular embasadas no modelo *embedded-atom* (EAM) para o potencial interatômico. Tais simulações se dão através do software *Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS) e visam à obtenção dos dados necessários aos parâmetros selecionados para a caracterização do processo de fusão das nanopartículas. Utilizam-se, principalmente, análises da forma “energia potencial vs. temperatura”, “densidade vs. temperatura” e embasadas no índice de Lindemann e na função de distribuição radial como indicadores da transição de fase. Simulações preliminares vêm corroborando com a hipótese da dependência área-volume para o estabelecimento do ponto de fusão de uma nanopartícula de alumínio, em consonância com estudos anteriores acerca do assunto.