

Sessão 1

Física Interdisciplinar

001**OTIMIZAÇÃO DE GEOMETRIA E ESPECTRO RAMAN DE NANODIAMANTES.** *Felipe Homrich da Jornada, Perottoni (orient.) (UFRGS).*

Com o desenvolvimento da nanociência, há um interesse crescente na compreensão da matéria a nível nanométrico. Descobertas recentes de novas formas alotrópicas do carbono, como fulerenos, também servem de estímulo a esse estudo. Além do mais, o próprio diamante tem suas propriedades alteradas ao ter dimensões pequenas, porque, nessa condição, a forma como sua superfície se reconstrói poderá modificar a estrutura do núcleo. Um recente experimento no LAPMA serviu de estímulo a essa pesquisa: uma determinada amostra preparada a partir de fuligem, submetida a 7.7 GPa e 1200 °C, exibia frequências Raman na faixa de 1340 cm^{-1} , que diferem em cerca de 7 cm^{-1} da frequência Raman natural do diamante à pressão ambiente. Questionamo-nos, então, se a estrutura que tínhamos poderia se assemelhar a um diamante, e se o desvio Raman poderia ser explicado por uma pressão química causada por reconstrução de superfície. Iniciamos, assim, um trabalho computacional, com o objetivo de determinar a variação da estrutura e do espectro Raman de nanodiamantes, e o efeito que o número de átomos terá sobre esses aspectos. Nossos primeiros resultados, partindo de um *cluster* com 66 átomos e utilizando a teoria DFT, indicavam que a superfície fora reconstruída semelhantemente a um fulereno. O núcleo era pressionado pelas camadas externas, sob cerca de 160 GPa. A pressão muito elevada indicava que a estrutura seria instável, e cálculos posteriores exibiram frequências vibracionais negativas. Seguiremos, então, na otimização de *clusters* maiores. Tentaremos mostrar que a pressão no núcleo diminui à medida que o número de átomos aumenta; assim, poderia existir uma determinada configuração na qual o núcleo será pressionado de forma a emitir um espectro Raman com um pico em 1340 cm^{-1} . (PIBIC).