



Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais
24 a 28 de Novembro de 2024 | Fortaleza - CE - Brasil

Data e hora: 27/11/2024 | 09:50

Sessão: Sessão de Poster 4

Tipo: poster

Ref.: MmEMss32-005

Simulação de Nanopartículas Metálicas por Dinâmica Molecular

Apresentador: Rodolfo Politano

Autores (Instituição): Politano, R.(Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares);

Resumo:

Foram realizadas simulações de nanopartículas metálicas por meio da técnica de Dinâmica Molecular (DM). As nanopartículas metálicas têm sido objeto de interesse devido às suas propriedades únicas e diversas aplicações em áreas como catalisadores, eletrônica e medicina. A DM foi empregada como uma ferramenta para estudar o comportamento dinâmico e as propriedades termodinâmicas desses sistemas em escala microscópica. Inicialmente, as estruturas cristalinas das nanopartículas foram modeladas e as interações entre os átomos foram descritas por potenciais interatômicos adequados para os metais em questão (Fe, Al e Ni). As simulações foram conduzidas em condições controladas de temperatura e pressão, seguindo protocolos estabelecidos na literatura científica. As simulações de DM permitiram explorar a estrutura cristalina das nanopartículas, incluindo a distribuição de coordenação dos átomos, a orientação da superfície e a presença de defeitos cristalinos. Além disso, foram investigadas as propriedades mecânicas das nanopartículas, como módulo de elasticidade, resistência à tração e deformação plástica, proporcionando insights sobre o comportamento mecânico desses materiais em nível atômico. Outro aspecto abordado neste estudo foi a análise da reatividade química das nanopartículas metálicas em diferentes ambientes.

Foram realizadas simulações de interação com moléculas gasosas ou líquidas para investigar os mecanismos de adsorção, difusão e reação química na superfície das nanopartículas.