

E268

SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS DE LIGAS DE COBRE E OURO USANDO DINÂMICA MOLECULAR COM POTENCIAIS EMPÍRICOS

Giovani Manzeppi Faccin (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Edison Zacarias da Silva (Orientador), Instituto de Física Gleb Wataghin - IFGW, UNICAMP

Neste trabalho estudamos pequenos aglomerados e superfícies de cobre e ouro utilizando dinâmica molecular clássica nos ensembles microcanônico (N, V, E) e canônico (N, V, T). As interações entre os átomos do sistema são modeladas através de um potencial empírico de muitos corpos baseado em aproximações em segundo momento do modelo Tight-Binding. Através de simulações, procuramos determinar quais são as estruturas mais estáveis para os aglomerados e como eles interagem com superfícies metálicas. Os programas que efetuam as simulações foram construídos em Fortran 95, e um resumo detalhado do projeto e de alguns resultados se encontra no endereço: <http://www.ifi.unicamp.br/~gfaccin/ECA>

Dinâmica Molecular - Metais - Simulação