



E312

ESTUDO DE SUPERFÍCIES E NANOBASTÕES METÁLICOS UTILIZANDO DINÂMICA MOLECULAR COM UM POTENCIAL EMPÍRICO

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

Neste trabalho estudamos modelos simples de um pequeno nanobastão e de falhas em superfícies de ouro utilizando dinâmica molecular clássica com um potencial empírico de muitos corpos no ensemble canônico (N,V,T). Através das simulações algumas propriedades térmicas e mecânicas destes materiais são estimadas, gerando assim informação sobre o comportamento destas estruturas no estado sólido, na transição sólido-líquido e também em situações nas quais deformações estruturais são induzidas por um agente externo.

Dinâmica molecular - Metais - Simulação