

Programa Institucional de Bolsas
de Iniciação Científica

24 a 26 outubro de 2012

Pró-Reitoria de Pesquisa - Pibic/CNPq

Pró-Reitoria de Graduação - SAE/ Unicamp



E0572

FILMES DE ARGÔNIO EM SUBSTRATOS DE GRAFENO: UMA ANÁLISE ATRAVÉS DA DINÂMICA MOLECULAR

Lucas Madeira (Bolsista FAPESP) e Prof. Dr. Silvio Antonio Sachetto Vitiello (Orientador), Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW, UNICAMP

Estudamos, através do método de simulações de dinâmica molecular, as interações atômicas entre átomos de Argônio e uma folha de grafeno e fenômenos de adsorção. O potencial Lennard-Jones foi utilizado para descrever as interações Argônio-Argônio e Argônio-Grafeno, sendo que os átomos de Carbono permaneceram fixos. Estabelecemos critérios para determinar se um átomo havia sido adsorvido ou evaporado. Várias propriedades da primeira camada adsorvida foram calculadas e discutidas, como a área superficial específica, a distância entre a camada e o substrato, o calor isostérico e a função radial de distribuição de pares. Estudamos, também, propriedades das demais camadas formadas, e a interferência delas no ordenamento da primeira camada. Nossos resultados são compatíveis aos da literatura para nanotubos de Carbono, e também Argônio em substratos de grafite.

Argônio - Substratos de grafeno - Dinâmica molecular