



## XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2023
<b>Local</b>	Campus Centro - UFRGS
<b>Título</b>	Análise de dados espectroscopia de absorção de raios-X por intermédio de simulações atomísticas
<b>Autor</b>	ISABELA DA LUZ VEDANA
<b>Orientador</b>	GUSTAVO DE MEDEIROS AZEVEDO

Pretende-se, com este projeto, apresentar o estudo sobre como ocorre a formação de nanopartículas de Germânio (Ge) encapsulado em sílica utilizando simulações atomísticas. A razão do desenvolvimento dessa pesquisa centra-se na necessidade de compreender e controlar as propriedades físicas de um material sem mudar sua composição química, dessa forma, realizamos simulações de Dinâmica Molecular Clássica para entender o que acontece com esse material. Através do método da Dinâmica Molecular Clássica, investigamos a dinâmica dos átomos em um sistema contendo  $N$  átomos, resolvendo a equação de Newton individualmente para cada átomo. As forças resultantes das interações com átomos vizinhos são somadas, sendo sua natureza dependente das distâncias interatômicas e da derivada do gradiente da energia potencial. A integração numérica da equação de movimento ao longo de incrementos discretos de tempo nos permite rastrear a evolução da posição de cada partícula ao longo do tempo. Como resultado, é possível obter a configuração de equilíbrio final, a qual oferece uma visão quantitativa das diversas propriedades ligadas à estrutura local dos materiais em estudo. Realizando as simulações atomísticas com o Software LAMMPS, obtemos parâmetros de energia coesiva, pressão, temperatura, velocidade e a posição de cada partícula no sistema, entre outros; com os dados tratados, realizamos a análise dos mesmos utilizando o programa FEFF, o qual devolve um arquivo específico sobre o espectro XANES da amostra. Os resultados encontrados são consistentes com o ambiente químico que o Ge se encontra inicialmente dissolvido na sílica. Em síntese, os espectros XANES de borda K resolvidos no tempo são consistentes com um cenário em que a amostra, conforme depositada, consiste em átomos de Ge dispersos em uma matriz de sílica amorfa.