



Evento	Salão UFRGS 2024: SIC - XXXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2024
Local	Virtual
Título	Análise da morfologia de nanopartículas bimetálicas de cobre e prata por simulações de dinâmica molecular
Autor	RUAN MACHADO MARTINS
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Autor: Ruan Machado Martins Orientador: Andre Rodrigues Muniz

Título: Análise da morfologia de nanopartículas bimetálicas de cobre e prata por simulações de dinâmica molecular

Nanopartículas bimetálicas de cobre e prata possuem grande potencial de aplicação como catalisadores para reações químicas, tais como em fotocatalise e fotossíntese artificial. É importante conhecer as possíveis morfologias para essas partículas e como podem ser controladas durante a síntese, a fim de entender melhor seu papel em aplicações práticas. O estudo consistiu na análise morfológica destas nanopartículas sob variados arranjos (*core-shell*, *core-shell* invertido, homogêneas e *Janus*) assim como de filmes de espessura nanométrica (*slabs*), inspirados por resultados experimentais do nosso grupo, empregando simulações de dinâmica molecular com o potencial EAM (no software LAMMPS). As estruturas foram submetidas à equilíbrio passando por variadas etapas de aquecimento e resfriamento. Os resultados mostram uma tendência dos átomos de prata de migrarem para a superfície quando altas temperaturas são aplicadas, independentemente do arranjo de partida, se mostrando como as configurações mais termodinamicamente favoráveis. Em contrapartida, para temperaturas moderadas, a morfologia original é mantida (limitadas pela cinética), e foi notada a formação de facetas nas superfícies das estruturas (com orientações [111] predominantes) e variadas reconstruções junto às interfaces Ag/Cu. Esses resultados trazem interessantes informações para interpretação de resultados experimentais, permitindo relacionar as mais prováveis morfologias e interfaces geradas com as condições de síntese empregadas, e entender melhor o papel da orientação das superfícies e natureza das interfaces na eficiência catalítica do material.