

159

MODELAGEM DE REDES CONTÍNUAS DE CARBONO POR ANNEALING SIMULADO.*Felipe Homrich da Jornada, Cláudio Antônio Perottoni (orient.) (UFRGS).*

Das diferentes configurações que as estruturas de carbono podem assumir, as fases amorfas têm demonstrado alto potencial tecnológico. Recobrimentos amorfos de Diamond-Like Carbon exibem alto grau de dureza e têm sido utilizados em dispositivos ópticos. Pela possibilidade do carbono apresentar diferentes hibridizações, estruturas amorfas deste elemento podem exibir propriedades muito diferentes, dependendo da composição. Um modelo utilizado para descrever uma grande gama desses materiais não-cristalinos é o da Rede Contínua Aleatória, e trata-se da idealização de que não existem defeitos químicos na estrutura. A implementação computacional desse modelo, porém, tem sido feita pelo modelo de Wooten, Winer, and Weaire, que consiste em permitir trocas de ligações entre átomos de próximos. Apesar de ser um modelo simples e de reproduzir propriedades estatísticas experimentais, utilizam-se somente carbonos sp^3 , sendo de difícil extensão para carbono amorfo com distinta hibridização. A abordagem desenvolvida neste trabalho consiste em utilizar a técnica de annealing simulado para gerar redes contínuas de carbono. Define-se uma Função Custo, que é minimizada utilizando a implementação Monte Carlo de Metropolis. Assim, transforma-se um problema físico - design de um material - em uma função matemática de muitas variáveis. Resultados preliminares mostram que redes pequenas convergem para a estrutura de diamante, conforme esperado. Alguns testes com estruturas não-cristalinas mostraram que o algoritmo consegue gerar redes com uma distribuição estatística de ângulos muito semelhante à obtida experimentalmente. Dando seguimento a este trabalho, serão geradas estruturas maiores, com diferentes proporções de átomos com cada hibridização. Para estas estruturas maiores serão feitos cálculos da compressibilidade e de outros módulos elásticos, visando sua comparação com os valores obtidos para a estrutura de diamante. (BIC).