

288

ESTUDO DA ESTABILIDADE DINÂMICA DE NANOFIOS EM SITUAÇÃO DE RUPTURA. *Marlon Régis Schmitz* (Projeto: Propriedades Mecânicas de Nanofios, Instituto de Física, Departamento de Física, UFRGS).

Nos últimos anos há um interesse crescente no estudo de nanoestruturas na esperança de ter aplicações destas em novas tecnologias. Diversos estudos, teóricos e experimentais, tem-se voltado para os nanofios. Estudos teóricos e medidas experimentais nesta área tem trazido importantes resultados para o avanço tecnológico, em particular dos Microscópios de Força Atômica. Tais microscópios utilizam-se de uma ponteira extremamente fina (a ponta tem na ordem de dezenas de átomos de diâmetro médio) para extrair informações de uma amostra de material através do contato “direto” com a superfície do material (varredura da superfície pela ponta de metal). Esta varredura, através da interação átomo da ponteira- átomo da amostra, mostra detalhes da superfície da ordem do angstrom. Estando o ponto chave para esta escala de precisão na ponteira (enquanto mais pronunciada a ponta mais detalhes se obtém), é vital também, neste caso, a forma da mesma. Os estudos na área da Dinâmica Molecular tem-se voltado para obter mais informações a respeito das estruturas filamentosas com diâmetro na casa das dezenas de angstroms, de forma a se melhorar a tecnologia de fabricação destas ponteiros, dentre muitas outras aplicações. Dados experimentais apontam para o ponto de ruptura quando o tensionamento de um nano fio metálico (geralmente ouro devido a alta condutividade) chega ao ponto de ter quatro átomos em uma ligação com distância média de aproximadamente 4 Å, quanto que as simulações teóricas predizem a ruptura antes dos 3 Å. No presente trabalho apresentamos animações por computador da dinâmica de nanofios antes e durante a ruptura por esticamento. Este representa o primeiro passo para o estudo sistemático da força de ruptura de nanofios como função do raio e o material.