

ESTUDO DA MOLHABILIDADE DE SUPERFÍCIES DE CARBONO E SILÍCIO AMORFAS VIA DINÂMICA MOLECULAR

Edgard Pacheco Moreira Amorim¹, Rafael Marques da Silva²

Palavras-chave: Molhabilidade, dinâmica molecular, potencial de Lennard-Jones.

Quando uma gota d'água se espalha sobre uma superfície sólida, assume uma forma estacionária que minimiza a soma de suas energias potencial e de superfície [1]. A resultante das tensões superficiais entre as fases líquida-sólida, líquida-gás e gás-sólida, determina o ângulo de contato θ entre a gota d'água e a superfície (a superfície é hidrofílica para $\theta < 90^\circ$ e hidrofóbica para $\theta > 90^\circ$) [2,3]. A busca por propriedades específicas de molhamento de superfícies sólidas é um problema fundamental para a indústria de revestimento. Neste trabalho, a molhabilidade de superfícies de Carbono e Silício cristalinas e amorfas foi investigada por meio de simulações de dinâmica molecular usando potenciais clássicos. Com o objetivo de construir superfícies amorfas, evaporamos Si e C cristalinos em diferentes temperaturas depositando-os sobre um substrato cristalino, também de Si e C. Após a deposição, o sistema foi resfriado até 300 K formando uma superfície amorfa. Em seguida, uma gota d'água previamente relaxada foi depositada sobre as diferentes superfícies formadas. O potencial de Lennard-Jones foi usado para descrever a interação entre a gota e a superfície e o potencial de Tersoff para construir as superfícies. A partir do perfil da gota depositada, podemos observar a dependência entre o ângulo de contato para diferentes temperaturas e discutir a relação entre a estrutura da superfície e suas propriedades de molhamento.

[1] F. Behroozi, H. K. Macomber, J. A. Dostal, and C. H. Behroozi, The profile of a dew drop, *Am. J. Physics* 64 (9), 1120 (1996).

[2] P. G. de Gennes, Wetting: statics and dynamics, *Rev. Mod. Phys* 57, 827 (1985).

[3] D. Bonn et al, Wetting and spreading, *Rev. Mod. Phys* 81, 739 (2009).

¹ Orientador, Professor do Departamento de Física - CCT - dfi2epma@joinville.udesc.br

² Acadêmico do Curso de Licenciatura em Física - CCT - UDESC, bolsista de iniciação científica PROBIC/UDESC.