
MODELAGEM COMPUTACIONAL DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE ZINCO

OLIVEIRA, Gabriela S.

Instituto Federal de Goiás, Campus Goiânia.

DASILVA, Cláudio J.

Instituto Federal de Goiás, Campus Goiânia.

Neste trabalho, empregamos simulações numéricas de Dinâmica Molecular (DM) com o objetivo de investigar a modelagem e a estabilidade estrutural de nanopartículas de óxido de zinco (ZnO). O ZnO é um material semicondutor amplamente estudado em função de suas propriedades ópticas, eletrônicas e catalíticas, que o tornam relevante em diversas aplicações tecnológicas, incluindo sensores, dispositivos optoeletrônicos e processos de catálise heterogênea. No entanto, a estabilidade das diferentes fases cristalinas em escala nanométrica ainda é uma questão em aberto e de grande interesse, sobretudo porque as propriedades físico-químicas do material podem variar significativamente dependendo da estrutura cristalina predominante. Para conduzir este estudo, utilizamos o pacote de simulação de Dinâmica Molecular **LAMMPS**, ferramenta bastante consolidada e versátil para modelagem atomística de sólidos e nanomateriais. O ZnO foi representado em suas três formas cristalinas conhecidas e consideradas termodinamicamente relevantes: **wurtzita (WZ)**, **blenda de zinco (ZB)** e **sal de rocha (RS)**. Essas estruturas apresentam diferentes arranjos atômicos e, conseqüentemente, distintas energias de formação, o que possibilita uma análise comparativa detalhada da estabilidade relativa entre elas. A interação entre os

átomos de zinco e oxigênio foi descrita pelo potencial **Buckingham-Coulomb**, amplamente utilizado para sistemas iônicos e particularmente adequado para óxidos semicondutores. Com base nesse modelo, foram realizadas simulações em diferentes condições termodinâmicas a fim de calcular tanto propriedades dinâmicas, como a energia total do sistema e a pressão média ao longo do tempo, quanto propriedades estruturais, entre as quais se destaca a **função de distribuição radial (RDF)**. Esta última foi empregada para validar o grau de ordem local nas estruturas simuladas e verificar a consistência dos parâmetros utilizados no potencial. Os resultados obtidos mostraram uma clara diferença na estabilidade relativa das três fases do ZnO quando modeladas em escala nanométrica. Embora as fases **sal de rocha** e **blenda de zinco** tenham se mantido estruturalmente coerentes durante as simulações, observou-se que a energia total por átomo nessas configurações é mais elevada quando comparada à da fase wurtzita. Tal evidência indica que, para o potencial de interação adotado, a **estrutura wurtzita é a mais estável** para nanopartículas de ZnO. Esse resultado está em concordância com observações experimentais reportadas na literatura, que apontam a wurtzita como a fase mais comum e estável do ZnO em condições ambientes. Assim, o presente estudo contribui para reforçar a validade do uso do potencial Buckingham-Coulomb na descrição do ZnO em nível atômico, ao mesmo tempo em que fornece uma base numérica para a compreensão da estabilidade relativa de suas fases cristalinas. Tais resultados podem servir de ponto de partida para investigações futuras envolvendo o crescimento controlado de nanopartículas, o estudo de defeitos estruturais e a análise de propriedades de superfície, aspectos de grande importância para aplicações tecnológicas emergentes.

Palavras-chave

Modelagem computacional; dinâmica molecular; óxido de zinco; nanopartículas.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio do Instituto Federal de Goiás. Agradecemos ao CNPq pela bolsa concedida.