

Modelagem de processos físicos e químicos em interfaces: do crescimento de materiais à interação água-rocha

PrInt UFF 88887.310427/2018-00

Coordenação: Fábio D. A. Aarão Reis (Física UFF)

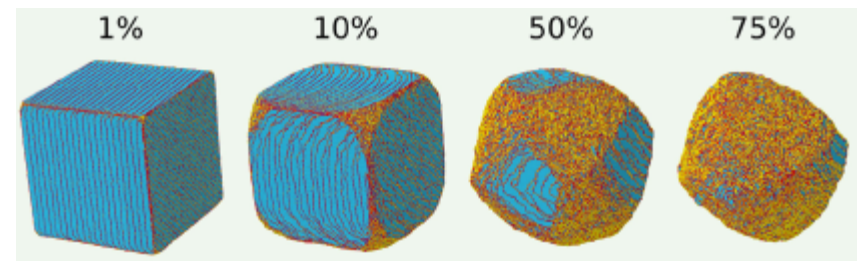
1) Dissolução de minerais

Simulações explicam faixa estreita na taxa de dissolução em meio alcalino

Ismael S. S. Carrasco e F. D. A. Aarão Reis, *Geochim. Cosmochim. Acta* **292**, 271-284 (2021).

Ismael S. S. Carrasco, Emanuel A. Machado, e F. D. A. Aarão Reis, *ACS Earth Space Chem.* **5**, 2755-2767 (2021).

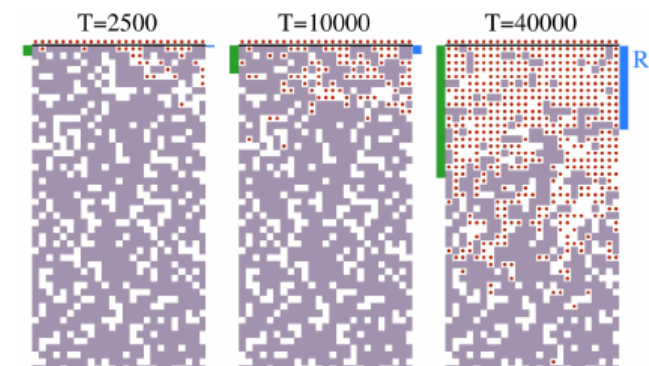
(estudantes e posdocs – nomes em vermelho)



2) Difusão de reagentes e dissolução de meios porosos

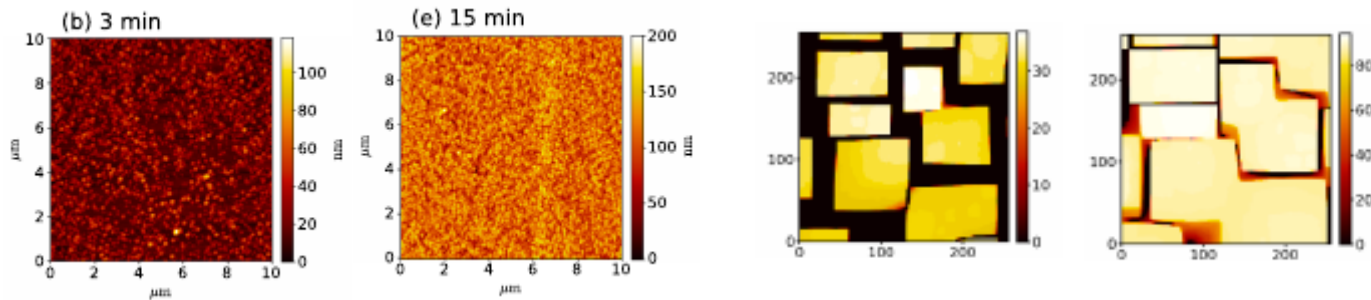
F.D.A. Aarão Reis. *Adv. Water Res.* **134** (2019) 103428.

Ismael S. S. Carrasco e F. D. A. Aarão Reis, *Phys. Rev. E* **103**, 022138 (2021).



3) Filmes finos para dispositivos de energia renovável

CdTe



Simulações relacionam rugosidade, correlações e formação de ilhas em filmes de CdTe

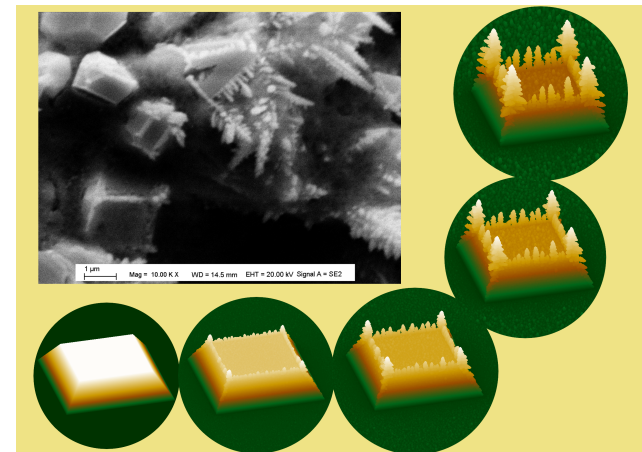
Tung B. T. To, Renan Almeida, S. O. Ferreira e F. D. A. Aarão Reis. Appl. Surf. Sci. 560, 149946 (2021).

Tung B. T. To e F. D. A. Aarão Reis. Surfaces 5, 251-264 (2022).

Filmes de prata multifuncionais

Simulações explicam transição de micropartículas para nanodendritos

S. Dokhan, D. di Caprio, A. Taleb e F. D. A. Aarão Reis, aceito na ACS Appl. Mater. Interfaces 2022.



Outros trabalhos em temas correlatos:

F. D. A. Aarão Reis, Daniel O. Mallio, J. L. Galindo e R. Huertas, Phys. Rev. E 102, 042802 (2020).

Daniel O. Mallio e F. D. A. Aarão Reis, Physica A 596, 127178 (2022).

F. D. A. Aarão Reis, B. Marguet e O. Pierre-Louis, 2D Materials 9, 045025 (2022).

B. Marguet, F. D. A. Aarão Reis e O. Pierre-Louis, Phys. Rev. E 106, 014802 (2022).

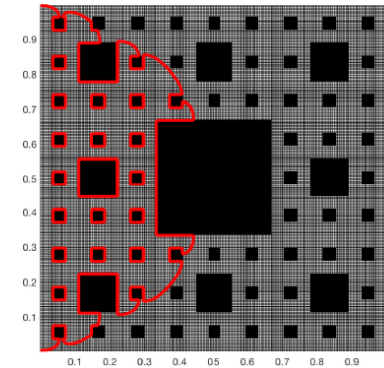
4) Transporte anômalo em meios porosos

Relações estrutura-transporte em meios fractais regulares e estatísticos

F.D.A. Aarão Reis, V. Voller. Phys. Rev. E **99**, 042111 (2019).

V. Voller e F. D. A. Aarão Reis, Int. J. Thermal Sci. **159**, 106577 (2021).

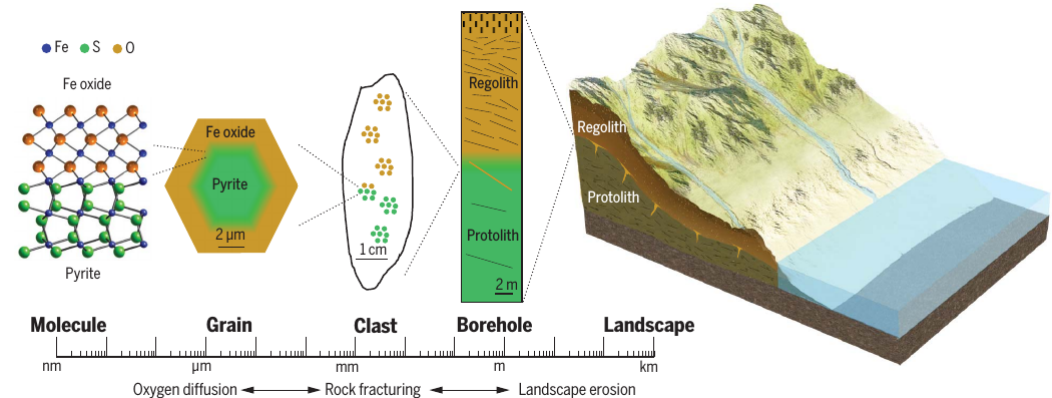
F. D. A. Aarão Reis e Vaughan R. Voller, Water Resour. Res. **57**, e2021WR029953 (2021).



5) Intemperismo e evolução geológica de rochas e solos

Intemperismo abiótico da pirita em shale – modelagem multiescala do transporte reativo

Xin Gu, Peter J. Heaney, F. D. A. Aarão Reis e Susan L. Brantley, Science **370**, eabb8092 (2020).



Outro trabalho no tema:

F.D.A. Aarão Reis, S.L. Brantley. Geochim. Cosmochim. Acta **244** (2019) 40–55.