



E0416

**PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, ELETRÔNICAS, CONFORMACIONAIS DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS SOBRE SUPERFÍCIES METÁLICAS**

Bruno Indrigo dos Santos (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Douglas Soares Galvão (Orientador), Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW, UNICAMP

Estudos sobre moléculas grandes depositadas sobre superfícies metálicas tem recebido crescente atenção nos último anos. Neste trabalho, através de simulação computacional por mecânica e dinâmica molecular buscamos caracterizar aspectos estruturais e dinâmicos da molécula conhecida como Landers. Para isso, utilizamos como ferramenta computacional o programa Accelrys Materials Studio com o campo de força Universal para uma descrição do ponto de vista da mecânica clássica. Estudamos as propriedades estruturais e eletrônicas, da molécula isolada e sobre superfícies cristalinas de cobre. Como exemplo da análise obtida com as simulações investigamos o padrão de energia de rotação e translação da molécula sobre diferentes superfícies de cobre (111, 110 e 100), determinando em qual superfície de cobre a molécula Landers é mais estável estruturalmente. Modelos sobre o padrão de reconhecimento molecular tipo chave-fechadura exibido por essa molécula foi investigado com base nas informações obtidas das simulações moleculares.

Dinâmica molecular - Nanotecnologia - Landers