



E0535

POLIMERIZAÇÃO DE CRISTAIS HETEROMOLECULARES DE C₇₀- CUBANO UTILIZANDO SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR

Luiz Claudemir Garcia Junior (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Vitor Rafael Coluci (Orientador),
Faculdade de Tecnologia - FT, UNICAMP

Fulerenos (C₇₀) e cubanos (C₈H₈) podem interagir por meio de ligações do tipo Van der Waals e formar cristais heteromoleculares de C₇₀-C₈H₈. Este trabalho investigou o processo de polimerização entre fulerenos e cubanos nesses cristais quando aquecidos à alta temperatura por meio de simulação computacional. As simulações foram feitas utilizando o método de dinâmica molecular baseada na aproximação *Tight-binding* com o programa Trocadero e realizadas no *cluster* de alto desempenho da Faculdade de Tecnologia da UNICAMP. À temperatura de 2100K, os cubanos começam a isomerizar-se e formar apenas poucas ligações com as moléculas de C₇₀. Em torno de 2600K e após 30ps, os isômeros dos cubanos se rompem e formam cadeias que se ligam às moléculas de C₇₀. A partir de 45 ps, observamos a formação de ligações entre mais de duas moléculas de C₇₀. Para uma temperatura mais elevada (3100K), ligações entre moléculas de C₇₀ ocorrem mais rapidamente, em torno de 26ps.

Polimerização - Simulação - Nanomateriais