



E439

### **DINÂMICA MOLECULAR DE POLÍMEROS CONJUGADOS**

Otávio Antônio Elias Modenesi (Bolsista SAE/UNICAMP) e Prof. Dr. Munir S. Skaf (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

No comportamento microscópico deste tipo de molécula identificam-se movimentos em vários trechos de uma cadeia. Os movimentos são verificados por meio de simulação computacional. Eles foram previstos por modelos que descrevem a força de interação entre partículas que compõem a cadeia polimérica. A técnica utilizada na modelagem da molécula baseia-se na dinâmica molecular. Com dados obtidos das posições e velocidades das partículas, os movimentos tanto da cadeia principal quanto das ramificações podem ser analisados. Os primeiros dados são tratados como informações fontes para cálculos seguintes. Tais cálculos quantificam variações angulares e também a variação da distância entre duas extremidades do "backbone" (cadeia principal). Esses últimos dados são os de maior relevância, pois serão levados em consideração na análise microscópica da estrutura molecular frente a situações de interesse como de polímeros de aplicabilidade tecnológica.

Polímeros conjugados - Dinâmica molecular - Simulação