



E0459

**PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, ELETRÔNICAS, CONFORMACIONAIS DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS ASSOCIADAS COM O GRAFENO POROSO SOBRE SUPERFÍCIES DE PRATA**

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 têm recebido crescente atenção nos últimos anos. Neste trabalho, através de simulação computacional por mecânica e dinâmica molecular buscou-se caracterizar aspectos estruturais e dinâmicos da estrutura orgânica conhecida como Grafeno Poroso. Para isso, foram utilizados como ferramentas computacionais os programas Accelrys Materials Studio e NAMD para uma descrição do ponto de vista da mecânica clássica buscando entender as etapas de formação da estrutura. Inicialmente foi realizado o estudo do monômero formador do grafeno poroso, o ciclohexa-m-fenileno (CHP). Estudou-se a estrutura do CHP isolado e também, depositado sobre superfícies de prata. Em seguida, realizamos um estudo de dinâmica molecular com vários monômeros e também de clusters de CHP sobre a prata. A partir das análises das barreiras de energias para a difusão molecular para diferentes superfícies de prata, observamos que a Ag (111) é a que permite a melhor difusão, facilitando o contato entre dois monômeros. Investigamos também como estruturas baseadas no grafeno poroso podem funcionar como “nanopeneiras” para alguns tipos de átomos e moléculas.

Simulação computacional - Dinâmica molecular - Nanotecnologia