



E0476

SIMULAÇÕES POR DINÂMICA MOLECULAR DE THERMAL SPIKES EM NANO-APATITAS

Heitor do Amaral Jurkovich (Bolsista PIBIC/CNPq), Pedro A. F. P. Moreira, Julio C. Hadler e Prof. Dr. Sandro Guedes de Oliveira (Orientador), Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW, UNICAMP

Este projeto se insere no contexto de Termocronologia por Traços de Fissão com possíveis resultados interessantes para Ciências dos Materiais. Traços latentes são formados pela passagem de fragmentos de fissão em minerais, tais como apatita. A passagem destes fragmentos causa um aumento de temperatura localmente no mineral, *thermal spikes*, desarranjando sua estrutura cristalina. O objetivo principal é simular este aquecimento localmente em nano-cristais de apatita usando Dinâmica Molecular. Para isso é gerado os nano-cristais de fluorapatita e clorapatita, usando o programa DL-Poly. Então se simula o *thermal spikes* nos cristais e depois se gera um programa para contar os defeitos na rede. Isso permitirá calcular a energia média necessária para que defeitos sejam criados por *thermal spikes*. Essa energia média é usada como valor de um dos parâmetros no modelo de *annealing* do Grupo de Cronologia do IFGW/UNICAMP, que pode ser aplicado na reconstrução de histórias térmicas de minerais, principalmente apatitas, com aplicações em casos de interesse geológico.

Dinâmica molecular - Simulação - Apatita