



T1109

SIMULAÇÃO MOLECULAR DA ADSORÇÃO DE MOLÉCULAS POLISSEGMENTADAS HETERONUCLEARES EM SUPERFÍCIES SÓLIDAS HOMOGÊNEAS

Renato Akira Okita (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Charles Rubber de Almeida Abreu (Orientador), Faculdade de Engenharia Química - FEQ, UNICAMP

A adsorção é um fenômeno que tem se destacado como alvo de pesquisas nas últimas décadas, devido à possibilidade de sua utilização em processos químicos industriais. Este trabalho tem como objetivo o estudo da adsorção de dímeros e trímeros heteronucleares com diferentes energias de interação em superfície sólida homogênea. Para isto é utilizado a simulação molecular como ferramenta, procurando condições termodinâmicas onde ocorram transições de fase de segunda ordem. Estas são identificadas através de gráficos de isoterma onde a transição de fase ocorre com mudança repentina na inclinação ou ponto de inflexão na isoterma. Na simulação, é utilizado o método de Monte Carlo Grande Canônico, que é um método estatístico de uso exaustivo de números aleatórios em seu cálculo. Utiliza-se o algoritmo de Metropolis, que se baseia em três movimentos básicos: locomoção, inserção e remoção de uma molécula. No caso de trímeros a identificação das transições de fase é realizada visualmente, através de snapshots, com um software implementado em MATLAB. As imagens auxiliam na verificação de alinhamentos das moléculas e conseqüentemente de possíveis transições de fase de segunda ordem. Neste trabalho são consideradas apenas substâncias puras além de segmentos genéricos denominados de tipo A e B.

Adsorção - Monte Carlo - Equilíbrio