



T1142

SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO DA ADSORÇÃO DE MOLÉCULAS HETERONUCLEARES EM SUPERFÍCIE SÓLIDA HETEROGÊNEA

Renato Akira Okita (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Charlles 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 industriais. Este trabalho tem como objetivo o estudo da adsorção de moléculas polissegmentas heteronucleares em superfície sólida heterogênea. Para isto é utilizada 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. A heterogeneidade do sólido ocorre através da existência de sítios ativos com energia de interação diferentes distribuídos aleatoriamente no lattice. São consideradas apenas substâncias puras com moléculas do tipo AB para dímeros e ABA para trímeros. No caso de trímeros, a identificação das transições de fase é realizada visualmente, através de *snapshots* gerados por um programa implementado em MATLAB. As imagens auxiliam na verificação de alinhamentos das moléculas e, conseqüentemente, de possíveis transições de fase de segunda ordem. Em resultados obtidos foram observados a influência dos sítios ativos na localização e no alinhamento entre as moléculas.

Adsorção - Monte Carlo - Sólido heterogêneo