

173

**PROPRIEDADES ELÁSTICAS DE REDES CONTÍNUAS ALEATÓRIAS DE CARBONO.** *Felipe Homrich da Jornada, Cláudio Antônio Perottoni (orient.) (UFRGS).*

Das diversas formas que o carbono pode assumir, a amorfa tem se mostrado de grande valor tecnológico, já que apresenta dureza elevada e pode ser depositada como filme. Porém, esses materiais, mesmo sendo estruturalmente semelhantes, podem exibir propriedades muito distintas, e os modelos atuais só tratam de uma pequena fração dessas estruturas. Este trabalho apresenta uma solução computacional mais geral para a simulação de materiais amorfos. Definimos uma Função Custo para cada configuração possível do material, e procuramos seu mínimo através do método de *Simulated Annealing*. O problema dessa minimização equivale ao de encontrar um material com as condições de hibridizações desejadas. Tendo em mãos um algoritmo flexível para a confecção desses materiais, pode-se relacionar as propriedades elásticas dessas estruturas com a proporção de carbono hibridizado  $sp^3$ ,  $sp^2$  e  $sp$ , por exemplo. Por envolver um número grande de cálculos, esse problema foi implementado em uma plataforma em grid. Com o trabalho desenvolvido, é possível, agora, varrer as diversas configurações estruturais de materiais amorfos de carbono em busca de uma que apresente propriedades de interesse. (PIBIC).