

027

**CANALIZAÇÃO EM NANOTUBOS DE CARBONO.** *Karenn Liège Borges, Cassio Stein Moura (orient.) (UFRGS).*

A pesquisa científica em torno das utilizações possíveis para os Nanotubos de Carbono vão desde a pesquisa biomédica para tratamento de tumores até a busca de novos materiais para a indústria eletrônica. Desta forma é de interesse geral conhecer melhor a estrutura e a resistência deste material. Através de simulações com o método da Dinâmica Molecular, buscamos simular a canalização de um átomo de Carbono em um Nanotubo de Carbono para verificar a transmissão de partículas através do tubo. A escolha do átomo de carbono para ser canalizado se deve ao fato de, por tem a mesma massa atômica que os átomos que compõe a estrutura, a troca de energia entre átomos projétil e da rede é máxima e, por conseguinte, a probabilidade de criação de defeitos também aumenta. Sendo assim, analisamos o pior caso possível em termos de produção de danos e esperamos que no caso prático de irradiação com outras partículas, sejam gerados menos defeitos. No início da simulação escolhemos a energia e o ângulo de incidência do projétil. Observamos que existe uma dependência no ângulo crítico em função da energia na forma de uma lei de potência. Nesta parte inicial do trabalho busquei aprender a usar as ferramentas de trabalho que são o código de simulação, programa de visualização gráfica e o ambiente linux. Reproduzi resultados já encontrados pelo grupo de pesquisa, que facilitarão minha incursão no campo inédito. (BIC).