

077 ESTUDO DE REAÇÕES DE POLIMERIZAÇÃO PELO MÉTODO DE MONTE CARLO. Paulo Augusto Netz e Dimitrios Samios. (Departamento de Química Inorgânica, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul).

A reação entre cis 1,2 ciclohexanodicarboxilânido e 1,4 butanodiol diglicidiléter, tendo amina terciária como iniciador é uma importante reação no estudo das resinas epoxi. No presente trabalho, esta reação serve como um caso particular do estudo de reações de polimerização, aplicando simulação Monte Carlo. O objetivo é a obtenção de um eficaz algoritmo de movimentação das moléculas, mediante simulação efetuada tomando-se modelos simplificados das moléculas reagentes, (modelos onde se omite os hidrogênios e se ignora o tamanho da ligação) e dispondo uma quantidade pré-determinada destas moléculas em posições aleatórias numa rede quadrada (2D). Em seqüência, movimenta-se as moléculas mediante passeio aleatório e define-se a reação como a proximidade de "sítios ativos", também previamente definidos, de acordo com o mecanismo de Matějka, o mais aceito pela literatura. Em estudo posterior pretende-se obter rotinas que, interligadas ao programa principal, todo ele escrito em FORTRAN 77 calculam, periodicamente, parâmetros relativos ao sistema, como tamanho dos agregados, dimensionalidade fractal e propiciam a descrição, a cada etapa, da estrutura do "polímer" formado. (CNPq)