

## Modelos de Nanoestruturas baseadas em Geometrias de Projeções Geométricas do $R^7$

Autores: Flávio M. B. Oliveira<sup>1</sup>, Cristiano C. Bastos<sup>2</sup> e Antonio C. Pavão<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidade Federal de Pernambuco, Departamento de Química Fundamental*

<sup>2</sup>*Universidade Federal Rural de Pernambuco, Departamento de Química*

**Resumo:** O carbono tem revelado surpreendentes nanoestruturas que provocaram uma verdadeira busca de novos materiais constituídos por esse átomo. Diferentes geometrias obtidas da matemática combinatória têm sido exploradas na modelagem desses sistemas [1]. Recentemente, projeções do espaço de sete dimensões ( $R^7$ ) forneceram, através de algoritmos sofisticados, geometrias peculiares e com propriedades bem estabelecidas [2]. O presente trabalho tem como objetivo construir estruturas de carbono baseadas nestas projeções de  $R^7$ . Os modelos construídos foram 8 expansões unidimensionais, 8 bidimensionais e 7 tridimensionais, chegando a sistemas com 564 carbonos. A unidade básica dessa projeção é comparável ao  $C_{24}$  [3]. Uma das características fundamentais dessa projeção é que essa estrutura preenche todo o espaço tridimensional euclidiano, algo peculiar em geometria. Através de cálculos AM1 observamos que as estruturas se estabilizam em geometrias com elevada simetria e com distâncias e ângulos de ligação uniformes. Distâncias em torno de valores típicos de três tipos foram observadas: 1,28Å, 1,42Å e 1,54Å. Os valores de energia do HOMO não apresentam variação significativa em comparação com o  $C_{60}$ , entretanto para o LUMO há uma diferenciação. Devem por isso, apresentar uma menor capacidade elétron-doadora. Um material formado por essas projeções deverá possuir menor estabilidade comparado ao  $C_{60}$  e uma maior maleabilidade, uma vez que a energia de ligação por átomo é menor e tende a diminuir com o aumento da estrutura. Assim, além de um exercício de matemática e química quântica, o estudo dessas estruturas pode conduzir a materiais promissores para aplicações práticas.

**Key-words:** nanoestruturas, geometria, projeções do  $R^7$ , propriedades eletrônicas

**Support:** Este trabalho tem apoio do CENAPAD de Campinas e do LQTC/UFPE

### References:

[1] L.C.B. da Silva, C. C. Bastos, F.G. Ribeiro, *Annals of Physics*, 379, 13 (2017).

[2] S. Lins, *European Journal of Combinatorics*, 9, 291 (1988).

[3] P. R. C. Kent, M. D. Towler, R. J. Needs, G. Rajagopal, *Physical Review B*, 62(23), 15394 (2000).