

Paralelas PA08

Confinamento em escala nanométrica: estudo em moléculas de oxigênio

Daniel V. P. Massote*(UFJF)

Resumo:

A física de altas pressões nos apresenta diversas oportunidades de pesquisa. Quando estamos no regime de pressões da ordem de GPa, é possível que ligações químicas não triviais sejam realizadas devido à minimização da energia do sistema. Neste estudo, exploramos as consequências do confinamento de moléculas de oxigênio e sua relação com fases do O₂ em altas pressões. Realizamos cálculos por primeiros princípios que evidenciaram a possibilidade de acessar fases cristalinas de alta pressão.

*E-mail: massote@ice.uff.br