

SALÃO DE  
INICIAÇÃO CIENTÍFICA  
**XXIX SIC**  
  
**UFRGS**  
PROPESQ



múltipla   
**UNIVERSIDADE**  
inovadora  inspiradora

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2017
<b>Local</b>	Campus do Vale
<b>Título</b>	Modelo de uma mistura usando o método de Dinâmica Molecular
<b>Autor</b>	MATHEUS SOUSA DOS SANTOS
<b>Orientador</b>	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

**Modelo de uma mistura usando o método de Dinâmica Molecular**

*Matheus Sousa dos Santos*

*Márcia C. Barbosa*

Nosso objeto de estudo para esse trabalho foi uma mistura de duas diferentes partículas que interagem entre si por um potencial contínuo. O foco do trabalho é representar um modelo teórico e comparar resultados com este.

Este projeto estudou o modelo de uma mistura através do método de Dinâmica Molecular e usando o potencial de Lennard-Jones para definir a interação entre as partículas conseguimos estudar as fases da mistura pela função de distribuição radial e montamos um diagrama de fases de pressão por temperatura.

Para assegurar que a simulação estava correta, esta foi feita primeiramente para o caso de uma única partícula e comparada com resultados da literatura. Após isso implementamos o algoritmo para a mistura, modificando a interação do potencial de Lennard-Jones para cada partícula. Além das medidas de distribuição radial e diagrama de fases, foram feitas medidas de pressão e energia. Nosso objetivo no momento é achar as transições de fases e comparar com o modelo teórico.