



E0478

**SISTEMAS CLÁSSICOS DE MUITOS CORPOS: UMA INTRODUÇÃO ATRAVÉS DA DINÂMICA MOLECULAR**

Lucas Madeira (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Silvio Antonio Sachetto Vitiello (Orientador), Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW, UNICAMP

Estudamos, através do método de simulações de dinâmica molecular, os fenômenos de muitos corpos onde efeitos quânticos possam ser desconsiderados em boa aproximação, mais especificamente sistemas Lennard-Jones nas fases sólida, líquida e gasosa. Damos início ao estudo de simulações de dinâmica molecular com a fundamentação teórica, a análise de um programa de código aberto simples e a implementação de funções mais sofisticadas nesse programa. Obtivemos resultados para propriedades físicas dos sistemas Lennard-Jones (temperatura, pressão e função radial de distribuição de pares). Estudamos os aspectos da teoria de elasticidade para sólidos cristalinos cúbicos, utilizando um sofisticado programa de código aberto para calcular propriedades elásticas do Argônio sólido. Os resultados foram comparados com outras simulações de dinâmica molecular e dados experimentais. Tendo dominado a técnica de dinâmica molecular para esse sistema formado apenas por átomos de Argônio, introduzimos uma folha de grafeno bidimensional. Calculamos propriedades termodinâmicas de interesse, comparando os resultados com outras simulações da literatura e também dados experimentais.

Gases nobres - Argônio - Dinâmica molecular