



E0445

FÍSICA ESTATÍSTICA DE POLÍMEROS: UMA ABORDAGEM COMPUTACIONAL ATRAVÉS DO MÉTODO MONTE CARLO

Alexandre Hernandes Barrozo (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Maurice de Koning (Orientador), Instituto de Física - IFGW, UNICAMP

Este trabalho tem como objetivo a aplicação de técnicas de simulação numérica em problemas no contexto de física da matéria condensada, especificamente moléculas poliméricas. Neste contexto o trabalho apresentará um estudo das propriedades termodinâmicas de sistemas pertencentes a esta classe de materiais através da Mecânica Estatística Clássica, utilizando simulação Monte Carlo. O trabalho será constituído em três partes: primeiro, o estudo básico de Física de Polímeros, com ênfase na abordagem teórica estatística utilizada para a descrição de propriedades físicas deste sistema; segundo, o estudo dos fundamentos das técnicas de simulação numérica Monte Carlo, que serão utilizadas para o cálculo de grandezas estatísticas em geral; terceiro, implementação das técnicas Monte Carlo para estudar uma coleção de problemas no contexto da Física Estatística de Polímeros. Dos problemas abordados, trabalharemos com cadeias poliméricas lineares genéricas e isoladas em 3 dimensões, considerando os efeitos de fatores como o volume excluído, a interação entre os monômeros com o meio em que o polímero se encontra, e o grau de polimerização.

Física de polímeros - Física Estatística - Física computacional