

Programa Institucional de Bolsas
de Iniciação Científica PIBIC

23 a 25
outubro

Pró-Reitoria de Pesquisa - Pibic/CNPq
Pró-Reitoria de Graduação - SAE/Unicamp



E0510

**IMPLEMENTAÇÃO DE DINÂMICA MOLECULAR BASEADA EM FUNÇÕES DE GREEN:
APLICAÇÃO NO ESTUDO VIBRACIONAL DE CADEIAS ATÔMICAS UNIDIMENSIONAIS**

João Cléber Neves de Freitas (Bolsista SAE/UNICAMP) e Prof. Dr. Vitor Rafael Coluci (Orientador), Faculdade de Tecnologia - FT, UNICAMP

Simulações computacionais são ferramentas poderosas que são utilizadas em diversas áreas da Ciência. Em particular, para se prever o comportamento de sistemas moleculares, simulações utilizando o método de dinâmica molecular clássica são empregadas. Nesse método, as equações do movimento (Leis de Newton) são integradas numericamente para se obter a evolução temporal de um sistema molecular. Para a descrição precisa do sistema molecular, é necessário um passo de integração muito pequeno ($\sim 10^{-15}$ s), o que torna essas simulações custosas computacionalmente para sistemas grandes ($\sim 10^5$ átomos). Esse projeto buscou implementar o código de dinâmica molecular clássica no estudo vibracional de uma cadeia atômica linear para posteriormente utilizar Funções de Green na potencialização do poder dessa simulação. Como resultado da primeira etapa do projeto foi obtida uma simulação estável e realística o que possibilitou a pesquisa mais aprofundada de como utilizar Funções de Green ao invés da dinâmica clássica. Não obstante o projeto teve de ser finalizado sem a obtenção de uma simulação completa usando Funções de Green, pois o bolsista iniciou seu estágio obrigatório e com isso pediu o cancelamento de sua bolsa.

Dinâmica molecular - Simulação computacional - Estudo funções de Green