

O trabalho realizado nessa bolsa de Iniciação Científica com orientação do Professor Doutor Alexandre P. dos Santos do grupo de pesquisa de Fluidos Carregados teve como objetivo estudar e aprender sobre a técnica de simulação computacional chamada de Dinâmica Molecular usando como objeto de estudo um fluido carregado com colóides. Colóides possuem incontáveis aplicações na área de pesquisa básica e também na indústria, exemplo imediato de um uso de colóides é no tratamento de água. Colóides são partículas de 1 a 1000 nm, tamanho esse suficiente para não ser dissolvida nem grande o suficiente para precipitar em uma solução, qualidade essa que nos permite estudar partículas em suspensão em um líquido. O método de estudo escolhido foi através da escrita de um código na linguagem de programação C realizar uma simulação de Dinâmica molecular. A simulação teve várias versões com complexidades gradativamente maiores, começando com um sistema cúbico contendo partículas com cargas positivas e negativas com um potencial de Lennard-Jones aplicado, depois evoluímos para um sistema esférico com o potencial de Lennard-Jones e o potencial Elétrico aplicados, e por fim um sistema esférico com um núcleo central carregado (o colóide) interagindo com o resto das partículas através dos mesmos potenciais. Os resultados parciais obtidos nesse estudo foram a confirmação que a simulação estava condizente com o esperado em comparação a outras simulações através das medições da concentração radial de partículas e da temperatura do sistema.