

O trabalho de autoria do bolsista Artur Uhlik Fröhlich realizado nessa bolsa de Iniciação Científica com orientação do Professor Doutor Alexandre P. dos Santos do grupo de pesquisa de Fluidos Carregados, no Instituto de Física da UFRGS, de título “Simulações Computacionais de Soluções Coloidais” 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.