

ESTUDO COMPUTACIONAL DE NANOESTRUTURAS E NANOPARTÍCULAS

Wesley Vilela Dos Santos (wesley.vilela.dos.santos@hotmail.com)

Giovani Faccin (giovanifaccin@ufgd.edu.br)

A simulação computacional é uma ferramenta extremamente funcional para o desenvolvimento da ciência, em especial para a física, abrindo espaço para realização de estudos capazes de complementar medidas experimentais e esclarecer detalhes de fenômenos da natureza. No trabalho foram usados métodos computacionais baseados em modelos de spin para a descrição de propriedades magnéticas de materiais. Inicialmente foram feitas simulações de nanopartículas e de sólidos macroscópicos de Níquel por meio da evolução do modelo de magnetismo baseado em spins interagentes, conforme implementado no software Vampire, assim possibilitando a obtenção de parâmetros para diferentes arranjos estruturados. Em seguida houve um estudo dirigido da técnica de Dinâmica molecular – DM e um estudo exploratório do programa Lammmps, o qual possui o método DM implementado em seu código fonte. Utilizando o Lammmps foram realizadas simulações exploratórias para produção de vídeos que pudessem evidenciar qualitativamente a dinâmica dos átomos em nanopartículas de Prata quando resfriados ou aquecidos. Com isso, para as demais atividades quantitativas passíveis de serem abordadas, não houveram implementações, uma vez que o projeto teve maior parte de seu desenvolvimento direcionado ao estudo e exploração da metodologia dos modelos de spin, haja vista que o grau de complexidade desses é elevado. A apropriação das técnicas estudadas permitiu que o estudante pudesse obter informações mais completas das simulações que realizou e realizará. Dessa maneira, o projeto possibilitou a aquisição de uma série de habilidades, uma vez que proporcionou o contato com modelos e métodos computacionais para simulação de materiais magnéticos, os quais são relevantes para o contexto científico da física computacional e da matéria condensada. As técnicas e modelos estudados possibilitam para o futuro experimentos computacionais visando a exploração de propriedades de sistemas da matéria condensada de uma maneira mais completa, uma vez que o método DM possibilita a realização de simulações complementares às que foram desenvolvidas com o software Vampire.