



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2024: SIC - XXXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2024
<b>Local</b>	Virtual
<b>Título</b>	Modelagem de sistemas vítreos utilizando LAMMPS
<b>Autor</b>	MARIANA MORETTO PETKOVICZ ALMEIDA
<b>Orientador</b>	ALEXANDRE PEREIRA DOS SANTOS

A modelagem de sistemas vítreos ou eletrólitos é essencial para estudar e entender suas propriedades físicas e químicas, e tem aplicações em biomedicina, engenharia, e como modelos para nucleação e crescimento de cristais. Este trabalho tem como objetivo utilizar o software LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) para simular o comportamento de sistemas vítreos e eletrólitos em diversas condições, fornecendo informações sobre suas estruturas e dinâmicas. A metodologia envolve a criação de modelos computacionais que representam os sistemas de interesse, utilizando o LAMMPS. Inicialmente, são definidos os parâmetros do sistema, incluindo tipo de partículas e potenciais interatômicos, tal como Lennard-Jones. As simulações são realizadas em etapas, começando com a criação de uma configuração inicial. Depois, são feitas as definições no sistema e as configurações da simulação, nas quais o sistema é evoluído a cada passo sob diferentes condições de temperatura e pressão. Até o momento, foi simulado um sistema gasoso simples utilizando o fluido de Lennard-Jones, assim obtendo dados sobre as energias, temperaturas e a distribuição radial do sistema. Ademais, por causa do tempo curto desde o início da bolsa, o resultado esperado é fazer a modelagem do sistema de vidros de dissilicato de lítio e, além disso, também obter dados sobre energias, temperaturas e distribuição radial do sistema.