

Programa Institucional de Bolsas  
de Iniciação Científica

24 a 26 outubro de 2012

Pró-Reitoria de Pesquisa - Pibic/CNPq

Pró-Reitoria de Graduação - SAE/ Unicamp



E0534

### **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 pretende implementar o código de dinâmica molecular clássica baseando-se em funções de Green. Esse tipo de estratégia foi desenvolvido recentemente e permitiu realizar simulações utilizando passos de integração maiores que os usuais. Isso possibilitou investigar sistemas em situações mais realísticas. O código será aplicado inicialmente no estudo vibracional do sistema modelo de uma cadeia atômica linear. Apresentamos os estágios iniciais da implementação e os primeiros resultados envolvendo os ganhos computacionais.

Dinâmica molecular - Implementação de DM - Funções de green: aplicação