



**Universidade:  
presente!**

**UFRGS**  
PROPEAQ



**XXXI SIC**

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2019
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Diagrama de fases de uma mistura Lennard-Jones
<b>Autor</b>	JÉSSICA THAUANY SILVA GONÇALVES
<b>Orientador</b>	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

# Diagrama de Fases de uma mistura Lennard-Jones

Jéssica Thauany S. Gonçalves  
Orientadora: Márcia C. Barbosa  
UFRGS

Neste trabalho realizamos dinâmica molecular, uma técnica de simulação computacional que tem como principal objetivo analisar o comportamento de moléculas em função do tempo, no ensemble NVT. Encontramos o diagrama de fases de pressão versus temperatura de uma mistura de dois tipos de partículas, A e B, modeladas por um sistema Lennard-Jones onde há interação entre A e B tal que o solvente A é muito menor que o soluto B. Um exemplo deste tipo de mistura é a solução de uma dispersão coloidal em água, colóides são moléculas muito maiores que a água e compreender como se dissolvem em meio aquoso tem considerável importância tecnológica.