

242

MÉTODOS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL APLICADO A CIÊNCIAS DOS MATERIAIS. *Camilla Zacché da Silva, Livio Amaral (orient.) (UFRGS).*

Apresento aqui dois temas diferentes, que tem grande parte em comum que é a simulação de sistemas físicos através da técnica de dinâmica molecular, o primeiro é o estudo da energia de deslocamento em redes cristalinas de Zr₂Ni e outro trata da canalização de fullerenos em nanotubos de C. Como a energia de deslocamento Ed tem um papel importante no estudo de irradiação de sólidos pois ela é definida como a energia mínima necessária para criar um defeito permanente na rede após uma colisão, focalizamos em ligas de Zr pois são comumente usadas na indústria nuclear como revestimentos e são constantemente irradiadas, podendo ser danificadas, visamos aqui fazer um estudo que possa aumentar a vida útil deste material. No segundo trabalho, estudamos a canalização de fullerenos através de nanotubos de C, sabemos da literatura que é possível conduzir partículas através de nanotubos, queremos aqui estudar as condições nas quais isto acontece visando uma aplicação em radioterapia. Fazemos os dois estudos baseados na dinâmica molecular de primeiros princípios, que não considera fenômenos quânticos. (PIBIC).