

108

ESTUDOS DE SIMULAÇÃO DA VISCOSIDADE DE CISALHAMENTO PARA O METANO LÍQUIDO.

Márcio de C. Pereira, Hubert Stassen (Departamento de Físico Química, Instituto de Química, UFRGS)

Muitas das substâncias de interesse para a humanidade encontram-se na fase líquida. Apesar de existirem teorias plenamente satisfatórias para a caracterização de gases e de sólidos, ainda hoje não foi consolidada uma teoria que se aplicasse perfeitamente aos líquidos. Por esta razão é que, para que se estime as suas propriedades, tem-se recorrido a métodos iterativos. Neste trabalho, utilizou-se a metodologia da simulação computacional da dinâmica molecular com o objetivo de obter a viscosidade de cisalhamento na fase líquida do metano a um estado termodinâmico correspondendo à temperatura de 131K e densidade de $0,395\text{g/cm}^3$. A viscosidade foi calculada como integral sobre a função de correlação temporal de Green-Kubo, a qual foi obtida através de trajetórias do cálculo dinâmico molecular. Executou-se o desmembramento desta função em contribuições cinéticas e potenciais assim como o entrecruzamento destes termos. Utilizaram-se vários modelos de potenciais para a modelagem das interações intermoleculares. Entre estes o que obteve melhor performance foi um potencial de Lennard-Jones contendo os cinco átomos como centros de interação, o qual resultou numa viscosidade de cisalhamento de 0,87mpoise enquanto que o valor experimental referido na literatura é de 0,94mpoise.