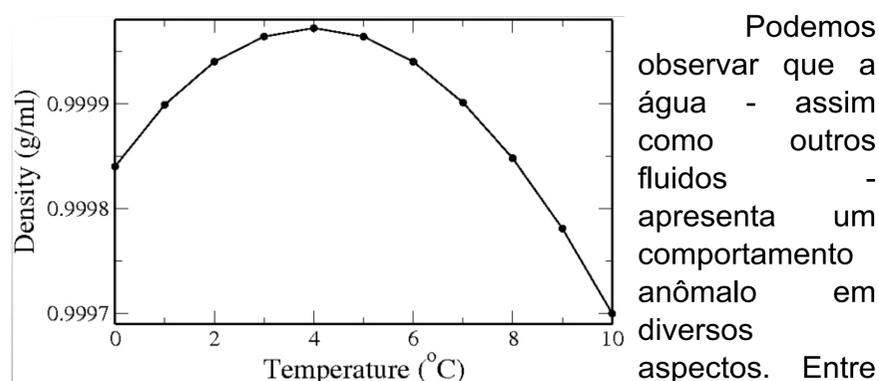


Introdução

Este trabalho teve como objetivo estudar as anomalias presentes na água. Para tal utilizamos um modelo simples de dinâmica molecular, na tentativa de reproduzir estes comportamentos anômalos, mais especificamente as anomalias na difusão e na densidade.

Anomalias da Água



Podemos observar que a água - assim como outros fluidos - apresenta um comportamento anômalo em diversos aspectos. Entre as principais anomalias que

Figura 1: Gráfico experimental da anomalia na densidade para água.

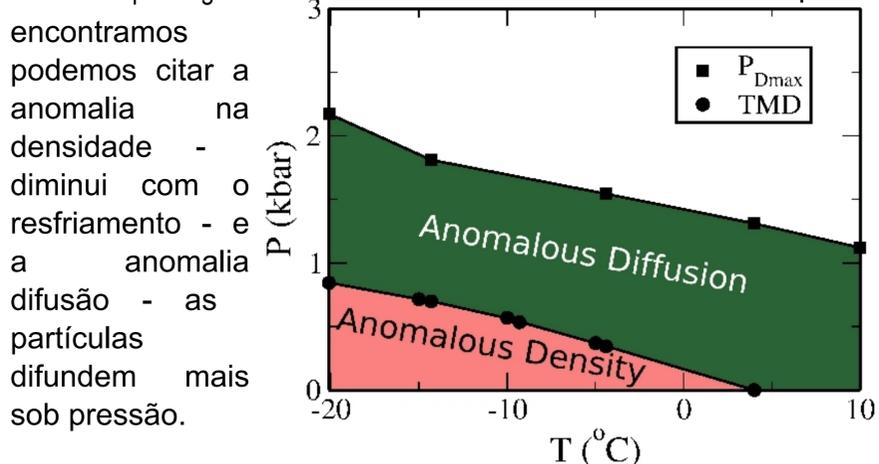


Figura 2: Gráfico experimental das anomalias da densidade e difusão

Modelo

Em nosso modelo usamos dinâmica molecular em uma caixa cubica com condições de contorno periódicas. As partículas de raio σ acopladas de maneira a formar dímeros. A distancia entre as partículas dos dímeros é de $\lambda\sigma$. Para a interação entre os dímeros utilizamos um potencial tipo Leonard-Jones adicionado de uma Gaussiana.

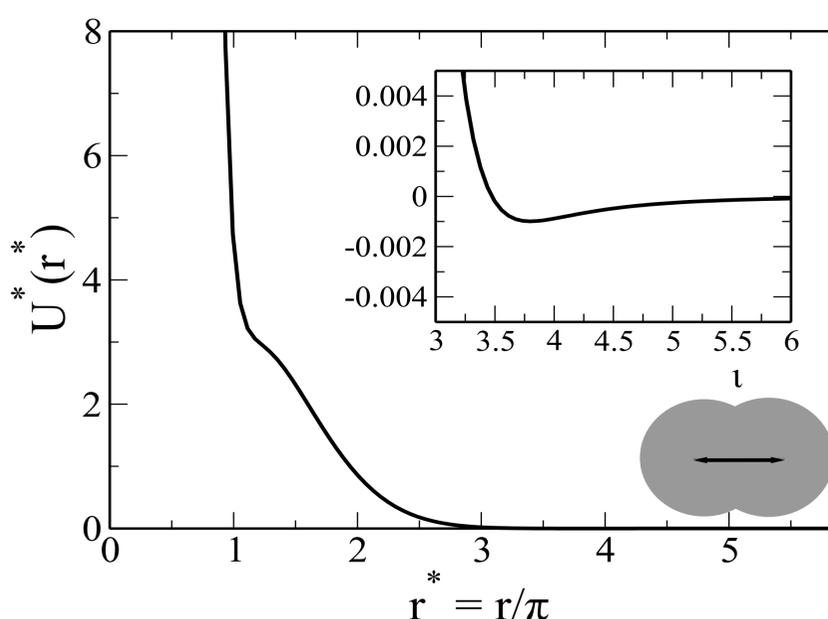


Figura 3: Gráfico do potencial. Detalhe da parte atrativa e exemplo de dímero.

Resultados

Podemos calcular os diagramas PT para diversos lambdas e assim encontrar as regiões de anomalias na densidade e na difusão. Ao fazermos este procedimento para mais de um lambda podemos compara-lo, observando assim como comportamento anômalo depende do λ .

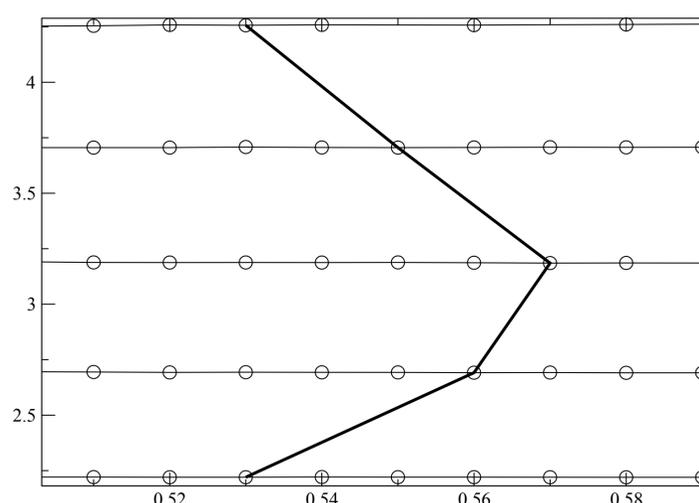


Figura 4: Gráfico da Temperatura de Máxima Densidade para $\lambda=0.50$. A TMD identifica a região de anomalia na densidade.

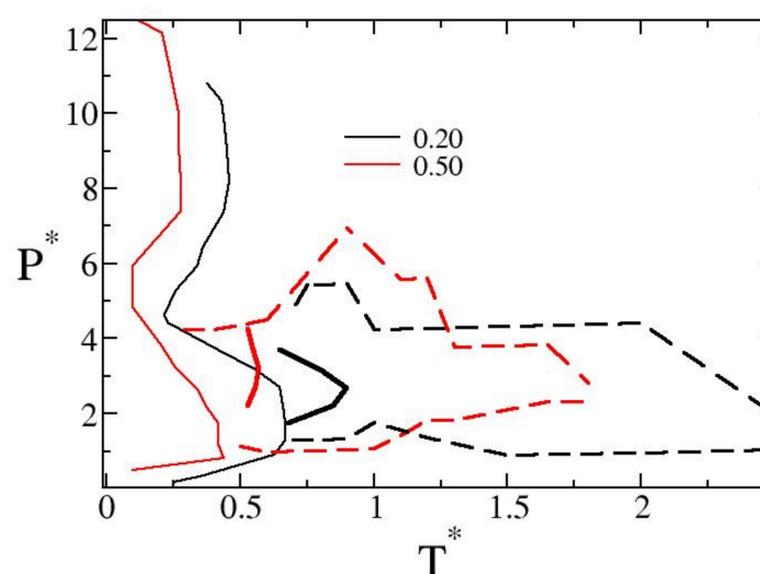


Figura 5: Diagrama PT para $\lambda=0.50$ e $\lambda=0.20$, com a transição sólido-fluido, anomalias na densidade e na difusão.

Conclusões

Nosso modelo apresentou as anomalias de densidade e de difusão coerentes com as medidas experimentalmente para água. Além disso, podemos ver que ao variarmos o λ obtivemos variações no diagrama de fases. Porém, ao contrario do esperado, as regiões anômalas para dímeros não se aproximam da região anômala para esferas únicas com a diminuição do λ .