

Diagrama de Fases e Anomalias Similares às da Água em Fluidos Complexos tipo *Soft-Core Shoulder-Dumbbell*

A água apresenta comportamento anômalo em muitas de suas propriedades e, apesar de sua importância, muitos destes ainda não são totalmente compreendidos. Estudos teóricos permitem avaliar o comportamento de fluidos de formas inacessíveis experimentalmente. Assim, o estudo por meio de fluidos modelo pode fornecer uma melhor compreensão do comportamento de fluidos complexos.

Através de simulações computacionais de dinâmica molecular estudou-se propriedades termodinâmicas e dinâmicas de um sistema composto por dímeros, utilizando *ensembles* NVT. As partículas que compõem estes dímeros são ligadas rigidamente por um comprimento de ligação λ e interagem com todas as partículas de outros dímeros através um potencial obtido combinando-se uma função gaussiana e um potencial Lennard-Jones. Para determinados valores dos parâmetros da gaussiana obtém-se um potencial efetivo tal que o sistema apresenta anomalias termodinâmicas, dinâmicas e estruturais que, em um diagrama de fases de pressão por temperatura, segue mesma hierarquia que a água. Neste sistema foi avaliada a influência do parâmetro λ sobre as regiões destas anomalias, bem como o comportamento rotacional dos dímeros, avaliando também se a difusão rotacional e translacional estariam acopladas, como de fato ocorre em modelos “reais” de água.