

A água apresenta comportamentos anômalos 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.

Neste estudo, esferas *soft-core* são unidas por uma ligação rígida, formando dímeros. Estas esferas são sujeitas a interações intermoleculares aos pares do tipo Lennard-Jones Gaussian (LJG) e seu comportamento é avaliado por dinâmica molecular no *ensemble* NVT.

Este sistema apresenta, sob determinadas condições, anomalias similares às da água (*waterlike anomalies*), no que diz respeito à suas propriedades estruturais, dinâmicas e termodinâmicas.

Simulações realizadas com diversos parâmetros de densidade, temperatura e comprimento de ligação do dímero permitem a elaboração de diagramas de fases. Constata-se que as anomalias apresentadas por este fluido modelo apresentam mesma hierarquia que encontrada na água real, isto é, uma grande região de anomalias estruturais englobando a região de anomalias dinâmicas que, por sua vez, engloba a região de anomalias termodinâmicas.

Comparado com o modelo monomérico (isto é, um fluido constituído pelas mesmas esferas, sujeitas ao mesmo potencial efetivo, porém não ligadas) o modelo dimérico apresenta um comportamento anômalo análogo, porém mais acentuado.

No momento está se estudando o comportamento do novo grau de liberdade apresentado pelo dímero, sua rotação. Constata-se um comportamento não-monotônico da velocidade rotacional em função da densidade, sugerindo um comportamento anômalo. Isto também poderia ser uma consequência das características intrínsecas do potencial empregado, onde poderia haver regiões de densidade suficientemente alta e de baixa temperatura onde os dímeros não tem energia suficiente para transladar a longas distâncias, mas poderiam permanecer em posições preferenciais com grande velocidade de rotação. Assim, busca-se separar as componentes de energia cinética translacional e não-translacional, avaliando a relação entre as temperaturas translacionais e rotacionais.