



Evento	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2022
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Anomalias termodinâmicas de misturas água-álcool
Autor	VITÓRIA TESSER HENKES
Orientador	CILAINE VERONICA TEIXEIRA

Orientadora: Cilãine Verônica Teixeira
Bolsista: Vitória Tesser Henkes
Período: 01/09/2021 a 31/08/2022

Além de ser essencial para a manutenção da vida e ocupar $\frac{2}{3}$ da superfície do nosso planeta, a água apresenta diversas propriedades físicas e químicas que ainda precisam ser estudadas. Ela possui mais de 70 comportamentos anômalos, que possibilitam sua ampla utilização por seres vivos das mais variadas formas. É mostrado na literatura que algumas dessas anomalias são acentuadas com a adição de pequenas frações molares de álcoois de cadeia curta, como o terc-butanol, e imagina-se que a causa desse fenômeno seja a formação de estruturas chamadas de clatratos. Nesta Iniciação Científica, pretende-se investigar melhor a estruturação molecular dessa mistura termodinamicamente anômala afim de corroborar ou não a teoria dos clatratos. Está sendo utilizado o método experimental de SAXS, espalhamento de raios-X a baixos ângulos, e o método computacional de simulação de dinâmica molecular. Inicialmente, antigos dados de SAXS foram manipulados para possibilitar a aprendizagem de detalhes dessa técnica, e atualmente dados de um novo experimento, realizado na USP, estão sendo tratados e analisados. Paralelamente, foi construída a base de uma simulação de dinâmica molecular utilizando-se o potencial de Lennard-Jones e o termostato de Nose-Hoover, e pretende-se aprimorar a simulação para a utilização do LAMMPS, simulador atômico/molecular massivamente paralelo em grande escala. Os resultados gerados até então são produtos de testes das técnicas de análise em desenvolvimento, e vêm demonstrando estarem de acordo com as análises esperadas. Com isso, é possível seguir seguramente no desenvolvimento dessas técnicas para estudar os dados gerados de forma precisa e obter conclusões a respeito da mistura de água-terc-butanol.