

A água, apesar da sua importância em literalmente todos os setores da vida e da tecnologia, continua sendo um dos sistemas cujo comportamento ainda lança enormes desafios à racionalização científica. Muitas são as anomalias exibidas pela água e muitas soluções aquosas, dentre elas a solidificação acompanhada de diminuição da densidade, a existência de um máximo de densidade em torno de 4 graus Celsius, além de anomalias na capacidade calorífica e na compressibilidade.

Usando simulações de dinâmica molecular, investigamos propriedades termodinâmicas de dímeros rígidos interagindo com um potencial intermolecular repulsivo com atenuação que se assemelha a um ombro. A competição entre as duas escalas presentes no potencial de caroço atenuado e a terceira escala imposta pelo potencial dimérico conduz a um diagrama de fases muito mais rico quando comparado com o sistema monomérico. O sistema dimérico exhibe duas regiões no diagrama de fases de pressão x temperatura onde a difusão e a densidade são anômalas. Uma anomalia estrutural também foi encontrada, englobando a região de anomalia termodinâmica.