



**REENCONTROS
NOVOS ESPAÇOS
OPORTUNIDADES**

XXXIV SIC Salão Iniciação Científica

**26 - 30
SETEMBRO
CAMPUS CENTRO**

Evento	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2022
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Anomalias termodinâmicas de soluções de álcool e água
Autor	CAMILA RAUPP DA LUZ
Orientador	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

Anomalias Termodinâmicas em Soluções de Álcool e Água

Estudante: Camila Raupp da Luz

Orientadora: Márcia Barbosa

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, sendo boa parte deles consequência das ligações de hidrogênio e da estrutura angular de suas moléculas. No entanto, certas anomalias são intensificadas ao misturar na água pequenas frações molares de álcoois de cadeia curta, como o terc-butanol. Por exemplo, a anomalia do alto valor do calor específico da água é consequência das ligações de hidrogênio entre suas moléculas. Ao misturar terc-butanol, esse valor fica ainda mais alto, indicando que há um aumento na estruturação da mistura. Conforme a literatura, esse comportamento é consequência da formação de agregados moleculares, chamados de clatratos. Desse modo, o objetivo deste trabalho é verificar a existência dessas agregações por meio de simulações de dinâmica molecular na linguagem C e por meio da análise de dados de espalhamento de raios-X a baixo ângulo (SAXS). No momento, ainda não há resultados do experimento de SAXS, pois estamos no processo de tratamento de novos dados. Assim, os resultados a serem apresentados são dos estudos sobre os fundamentos de dinâmica molecular com o potencial intermolecular Lennard-Jones para os ensembles NVE (Número de partículas, Volume e Energia constantes) e NVT (fixando a Temperatura por meio do Termostato de Nosé-Hoover). Pretende-se nos próximos meses terminar o tratamento e análise dos dados de SAXS e desenvolver uma simulação com dois tipos de partículas no programa LAMMPS, de modo que reproduzindo os resultados experimentais possamos compreendê-los com maior profundidade.