

Anomalias dinâmicas e Termodinâmicas em Modelos Tipo Água

A água é o material mais estudado da terra, mas a física por trás do seu comportamento é muito pouco conhecida. A água apresenta muitas anomalias, ou seja, comportamentos que diferem do comportamento esperado tais como anomalias na densidade, na difusão e anomalias estruturais. Por exemplo, quando diminuimos a temperatura de certo material, esperamos que sua densidade diminua, na água isso não acontece, ela apresenta um máximo de densidade em aproximadamente 4°C. A explicação para esse comportamento está na formação de pontes de hidrogênio. Para entender esses comportamentos muitos modelos foram propostos. Nesse trabalho propomos um modelo de dímeros que interagentes para estudar essas propriedades.

Nosso modelo consiste basicamente de 250 dímeros formados por duas partículas cada. Cada partícula do dímero interage com as outras partículas através de um potencial Lennard-Jones acrescido de uma gaussiana. As partículas do dímero estão rigidamente ligadas, e distanciadas de uma distância fixa λ dos seus centros de massa. Esse modelo nos permite estudar anomalias da densidade e difusão bem como anomalias estruturais.

Para analisarmos as anomalias do modelo utilizamos diagramas de fase pressão X temperatura e densidade X difusão. Além disso utilizamos vídeos para entendermos as diferentes fases que o sistema apresenta.