

247

ANOMALIAS DINÂMICAS COM POTENCIAIS DO TIPO SHOULDER. José Fernando Raymundi, Marcia Cristina Bernardes Barbosa (orient.) (UFRGS).

Este trabalho mostra, usando simulações computacionais, a dinâmica translacional de partículas interagindo através de um potencial esferossimétrico do tipo *shoulder*, bem como a dinâmica translacional e rotacional de moléculas diatômicas interagindo através de um potencial do tipo *step*. O potencial do tipo *shoulder* foi proposto por Cho. Ele consiste essencialmente, num potencial de interação do tipo Lennard-Jones acrescido de uma gaussiana. Um aspecto importante nos potenciais *core softened* é o comportamento complexo do diagrama de fases, pois dependendo da escolha de parâmetros é possível encontrar um comportamento anômalo, inclusive com possibilidade de haver transições de fase entre líquidos de diferentes densidades. No potencial aqui proposto, não há parte atrativa, (portanto os sistemas não apresentam transição líquido-gás), a rampa é substituída por uma série de degraus, e no lugar de partículas monoatômicas, investigamos dímeros de partículas, (*dumbels*), interagindo mediante este potencial. O uso de dímeros possibilita o cálculo da difusão rotacional. Constatou-se, em simulações anteriores, que este potencial apresenta anomalia na densidade. (Fapergs).