

DIAGRAMAS DE FASE E ANOMALIAS EM MODELAGENS DE SUBSTÂNCIAS TIPO ÁGUA

Gabriel San Rodrigues Ribeiro Câmara¹, Murilo Sodre Marques²

*¹Discente do Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias (CCET/UFOB, Barreiras-Ba/Brasil),
gabriel.c3030@ufob.edu.br,*

*²Docente do Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias (CCET/UFOB Barreiras-Ba/Brasil), Murilo
Sodre Marques murilo.sodre@ufob.edu.br*

A água é a substância no estado líquido mais abundante no planeta Terra e foi um fator crucial para o desenvolvimento da vida como a conhecemos. Possuindo dezenas de anomalias, a água possui uma região de densidade máxima ainda no estado líquido, o que faz o gelo flutuar e permitiu a existência e evolução da vida em períodos frios e regiões frias do planeta. As moléculas de H_2O se organizam em formato tetraédrico por ligações de hidrogênio e as anomalias se encontram em regiões onde ocorre uma competição entre estruturas mais e menos densas, comumente associadas à criação e destruição dessas ligações. Dentro do comportamento peculiar da água e de substâncias tipo água, temos uma região super-resfriada que possui difícil acesso experimental, onde a substância se solidifica com a menor das perturbações. Algumas formas de estudar essa região super-resfriada envolvem adicionar alguma substância para retardar o congelamento ou usar simulações computacionais. O presente trabalho utiliza técnicas de dinâmica molecular (DM), através do software de código aberto LAMMPS, para simular uma substância tipo água que consiste em nanopartículas (NP) enxertadas com polímeros em 3 dimensões. Consistindo em atribuir condições iniciais para um conjunto de partículas e evoluir temporalmente o sistema integrando as equações clássicas de movimento, a DM é capaz de fornecer médias de grandezas físicas importantes para a compreensão de diversos fenômenos. A fim de diminuir os sítios de interação entre as moléculas e assim obter uma economia e celeridade computacional, sem perder a resolução necessária para os fenômenos almejados, o modelo coarse grained foi utilizado, onde todo o conjunto de NP enxertadas é representada como uma esfera. Por possuir um bom histórico com a representação de anomalias semelhantes à água, o potencial núcleo amolecido foi usado para obter as interações desejadas entre as partículas do sistema. Com 864 partículas, a caixa de simulação passou por uma fase de equilíbrio no ensemble microcanônico e uma fase de produção de médias no ensemble isobárico-isotérmico, onde as propriedades de interesse foram obtidas. Uma competição entre escalas de comprimento foi obtida para as primeiras pressões, onde as partículas tendem a se concentrar na segunda escala de distância, analisando a função de distribuição radial. Com o aumento da pressão, as partículas passam a ficar presas na primeira escala de comprimento e inicia a linha de temperatura de máxima densidade (TMD) a partir da pressão reduzida 0.80. Além da anomalia mais conhecida, também foram encontradas anomalias estruturais a partir da análise do parâmetro de ordem translacional, que apresenta uma região de diminuição com o aumento da pressão. Uma região de anomalia dinâmica também foi observada, onde o coeficiente de difusão apresenta um crescimento com o aumento da pressão. Uma transição de fase de primeira ordem foi obtida para as temperaturas iniciais e uma análise das fases do sistema a partir dos arquivos de trajetória usando o software OVITO mostrou a presença de 3 fases: uma fase sólida FCC, uma fase líquida de alta densidade e uma fase líquida comum.

Palavras-Chave: Dinâmica molecular, Anomalias, Sistemas tipo água, Transição de fase.

Agência Financiadora: Voluntário.