

FUNÇÕES RESPOSTA TERMODINÂMICAS EM DINÂMICA MOLECULAR VIA INTERAÇÕES EFETIVAS

Tatiana de Jesus Braga¹, Murilo Sodré Marques²

¹*Discente do Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias (CCET/UFOB, Barreiras-Ba/Brasil), tatiana.b5730@ufob.edu.br,*

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

Líquidos simples são frequentemente estudados por meio de potenciais isotrópicos de pares, os quais descrevem a interação entre pares de partículas sem as interações dependerem da orientação espacial das partículas. Neste trabalho, foram realizadas simulações computacionais com o potencial quadrático suavizado (CSW) - uma versão suavizada do potencial quadrático, que compartilha algumas semelhanças com o potencial de Lennard Jones, e capaz de reproduzir de maneira mais eficiente o comportamento (teórico) de substâncias tipo água, possibilitando principalmente a análise de anomalias na densidade. Tais simulações envolveram a criação de uma tabela potencial, confecção do input que incluiu a escolha por unidades reduzidas LJ, a determinação da quantidade de partículas com rede de face cúbica centrada em uma caixa periódica, no ensemble NVT (o qual mantém o Número de partículas, o Volume e a Temperatura constantes (também chamado de ensemble canônico) . Os resultados obtidos ainda tem apresentado certas discrepâncias com os resultados da literatura, particularmente nos diagramas de Pressão versus densidade. Mais simulações estão sendo realizadas a fim de se entender todos os parâmetros (porventura divergentes) do sistema, solucioná-los e construirmos o diagrama de fase para este potencial utilizando simulações de Dinâmica Molecular através do software gratuito LAMMPS.

Palavras-Chave: Anomalias da Água, Dinâmica Molecular, LAMMPS, Potencial Suavizado.

Agência Financiadora: CNPq.