

TÉCNICAS PARA DETERMINAR A ANOMALIA NA DENSIDADE DA ÁGUA

Cristian Mafra Ledur¹

Ney M. Barraz Jr.²

Este trabalho é resultado da pesquisa desenvolvida durante a realização do projeto intitulado "Anomalias dinâmicas, termodinâmicas e estruturais na presença de campo gravitacional", do programa de bolsas PRO-ICT/UFFS. Durante a realização da pesquisa, buscou-se analisar a anomalia na densidade da água, utilizando o método de Dinâmica Molecular no *ensemble NVT* e controle de temperatura através do termostato de Nosé-Hoover, o qual traz uma vantagem para este tipo de sistema, pois trata-se de um método determinístico. A Dinâmica Molecular é um método de simulação que calcula a movimentação das moléculas individuais - as posições e momentos das partículas são descritas pelas equações de Newton. Utilizamos um potencial contínuo efetivo de duas escalas, sendo a primeira (a) ombro e a segunda (b) parte atrativa, para verificar a existência das anomalias, utilizando três técnicas: função da distribuição radial, parâmetro sigma e diagrama de fase pressão-temperatura. Após um diagnóstico realizado neste trabalho podemos dizer que todas as técnicas de análise de dados da Dinâmica Molecular foram eficientes em mostrar a anomalia na densidade da água, pois demonstraram coerência nos resultados obtidos. Além disso, as técnicas do parâmetro sigma e entropia de excesso, em especial, conseguiram mostrar que a anomalia na densidade é consequência direta da anomalia na entropia da água.

Palavras-chave: Dinâmica molecular. Anomalias da água. *Ensamble NVT*.

¹ Aluno do Curso de Graduação em Física - Licenciatura, Universidade Federal da Fronteira Sul (UFFS)/Campus Cerro Largo (cristianmafraledur@gmail.com). Bolsista do PRO-ICT/UFFS

² Professor Doutor Adjunto 2, Universidade Federal da Fronteira Sul (UFFS)/Campus Cerro Largo (ney.barraz@uffs.edu.br).