



ANÁLISE DA ANOMALIA NA DENSIDADE EM UMA SOLUÇÃO HETEROGÊNEA, ÁGUA-SILÍCIO

Magaiver Ten Caten (apresentador)¹

Andreia K. Barraz²

Ney M. Barraz Jr.³

Resumo: Este trabalho é fruto da pesquisa desenvolvida na realização do projeto intitulado "Anomalias Termodinâmicas, Dinâmicas e Estruturais em Potenciais Contínuos". Sabemos que a água é uma substância fundamental para a vida, ela é encontrada em meios intra e extracelulares, atuando como solvente universal. A compreensão das suas propriedades é um passo essencial para entendermos os processos biológicos relacionados a manutenção da vida. Ao analisar um copo com água e gelo, podemos perceber que o gelo, estado sólido da água, flutua na água, estado líquido. Este exemplo, mostra o comportamento anômalo da água, o qual classificamos como anomalia na densidade. A anomalia da densidade acontece devido a competição entre duas escalas que água pode possuir, uma de baixa densidade e outra de alta densidade. O objetivo deste trabalho foi de aplicarmos duas técnicas para a determinação da existência de anomalia na densidade, em uma amostragem de mistura heterogênea, de água e silício. Tanto a água e o silício apresentam anomalia na densidade, quando são analisados individualmente. Ao efetuarmos uma mistura heterogênea entre essas duas substâncias, qual será o comportamento da anomalia na densidade? Para respondermos essa problemática, utilizamos simulação computacional utilizando o método de Dinâmica Molecular no ensemble NVT e controlamos a temperatura através do termostato de Nosé-Hoover. 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. Construímos um sistema utilizando dois tipos de partículas, água e silício. Quando realizado a mistura, o silício tem a função de soluto e a água tem a função de solvente. O potencial de interação entre as partículas de água e as partículas de silício é um potencial contínuo efetivo de duas escalas, proporcionando anomalia na densidade. Já o potencial de interação entre as partículas de água e de silício é o potencial contínuo efetivo de uma escala, proporcionando assim a ausência de anomalia na densidade. Para verificarmos a existência das anomalias nesta mistura, utilizamos as técnicas de função de

¹ Acadêmico do curso de Física-Licenciatura, Universidade Federal da Fronteira Sul, campus Cerro Largo - RS, contato: magaivertc@gmail.com

² Graduada em Física-Licenciatura, atual Professora da Escola Técnica Guaramano, Guarani das Missões – RS, contato: andreiakornowski@gmail.com

³ Doutor em Física, atual Professor Adjunto 3 da Universidade Federal da Fronteira Sul, campus Cerro Largo – RS, contato: ney.barraz@uffs.edu.br

distribuição radial e o do diagrama de fase pressão-temperatura. Após efetuarmos as análises, podemos concluir que ambas as técnicas de análises de dados são eficientes em demonstrar a existência ou não da anomalia na densidade. Desta forma, ambas as técnicas demonstraram coerência nos resultados obtidos.

Palavras-chave: Dinâmica molecular. Anomalias da água. Ensemble NVT.

Categoria: Pesquisa

Área do Conhecimento: Equação de Estado, Equilíbrio de Fases e Transições de Fase

Formato: Comunicação Oral