



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Dinâmica Molecular: Potencial de duas escalas
Autor	MATHEUS SOUSA DOS SANTOS
Orientador	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Dinâmica Molecular: Potencial de Duas Escalas

Matheus Sousa dos Santos
Prof. Marcia C. Barbosa

O nosso trabalho consiste no estudo do diagrama de fases de pressão versus temperatura de um sistema de partículas interagindo através de um potencial de duas escalas. A idéia do uso de um potencial de duas escalas está relacionada ao fato de que a água apresenta anomalias que são atribuídas às duas configurações de octâmeros abertos e fechados que ela forma. Testamos esta hipótese procurando pela presença de uma região de anomalia na densidade neste diagrama de pressão versus temperatura.

O sistema utilizado para o estudo é inicializado com partículas confinadas e com velocidades aleatórias e posições pré-definidas dentro de uma rede cúbica. Para analisar a estrutura do sistema, usamos a função de distribuição radial e para localizar a transição de fases líquido-gás, usamos o diagrama $P^* \times T^*$