



## XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2023
<b>Local</b>	Campus Centro - UFRGS
<b>Título</b>	Anomalia da constante dielétrica da água para baixas temperaturas
<b>Autor</b>	CAMILA RAUPP DA LUZ
<b>Orientador</b>	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

Instituição: Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
Estudante: Camila Raupp da Luz  
Orientadora: Prof. Dra. Marcia Barbosa

Além de ser essencial para a manutenção da vida e ocupar  $\frac{2}{3}$  da superfície do nosso planeta, a água apresenta diversas propriedades físicas e químicas que ainda precisam ser estudadas. Ela possui mais de 70 comportamentos anômalos, sendo boa parte deles consequência das ligações de hidrogênio e da estrutura angular de suas moléculas. Para água a baixas temperaturas, as propriedades quânticas das ligações de hidrogênio se tornam relevantes para o entendimento de anomalias, como é o caso da constante dielétrica. A constante dielétrica da água pode ser dividida em duas partes: uma real (que está relacionada à interação da molécula com um campo elétrico externo) e uma imaginária (que está relacionada com a perda de energia na forma de calor). Trabalhos experimentais mostram que, ao contrário da maioria dos materiais, a parte imaginária não apresenta o comportamento monotônico decrescente como a parte real, mas possui um mínimo em torno de 20 Kelvin seguido de um crescimento conforme a temperatura diminui. Uma das explicações para esse fenômeno é que ocorre o tunelamento coletivo dos prótons compartilhados nas ligações de hidrogênio de um hexâmero. Visto que esse movimento dos prótons não altera o momento de dipolo, é possível explicar a presença da anomalia somente na parte imaginária da constante dielétrica. Para investigar os mecanismos dessa anomalia, serão utilizadas simulações de Dinâmica Molecular com Integral de Caminho (PIMD) em conjunto com a técnica de Resolução Adaptativa, para reduzir o custo computacional. Até o momento, foram realizadas simulações atomísticas utilizando o modelo rígido de água SPC/E com o objetivo de reproduzir diagramas de fase da literatura. A partir desses resultados, pretende-se aprender a simular sistemas clássicos com Resolução Adaptativa e posteriormente aplicar essa técnica em simulações de PIMD para calcular a constante dielétrica da água.