

036

**ANOMALIAS DINÂMICAS E TERMODINÂMICAS EM UM POTENCIAL ISOTRÓPICO TRIDIMENSIONAL.** *Thiago Escobar Colla, Paulo Netz, Alan Barros de Oliveira, Marcia Cristina Bernardes Barbosa (orient.) (UFRGS).*

Através do uso de dinâmica molecular e equações integrais, nós investigamos o comportamento dinâmico e termodinâmico de partículas que interagem por meio de um potencial tridimensional isotrópico. Esse potencial consiste basicamente de um potencial de Lennard-Jones acrescido de uma gaussiana, e pode assumir várias formas, conforme o ajuste de certos parâmetros. Mostramos que, para uma determinada escolha desses parâmetros, a densidade, a pressão constante, apresenta um máximo em uma certa temperatura. Determinamos, no diagrama  $P$ - $T$ , a curva correspondente aos máximos de densidade ( $TMD$ ). Além disso, verificamos que a constante de difusão,  $D$ , apresenta um máximo e um mínimo em densidades distintas, sendo o mínimo correspondente a região de menor densidade. No diagrama  $P$ - $T$ , vimos que a curva formada pelos pontos de extremos da difusão encontra-se em uma região externa à  $TMD$ , apresentando um comportamento análogo ao da água. (PIBIC).