Cristais Líquidos em Modelos Simples para Água

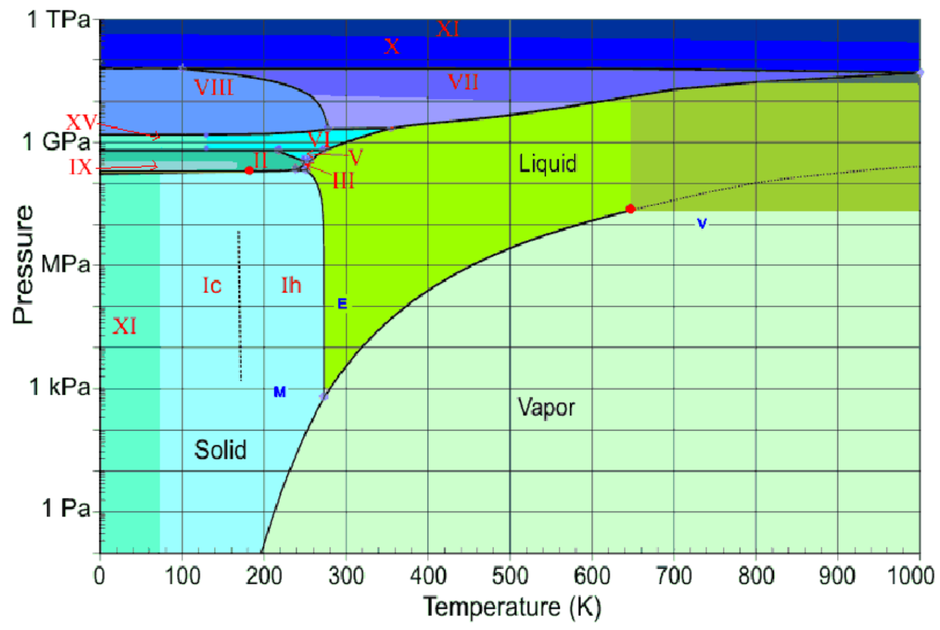
Juliana Zacharias Paukowski*

Cristina Gavazzoni*, Paulo Augusto Netz†, Marcia Cristina Bernardes Barbosa*

*Instituto de Física; †Instituto de Química - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

MOTIVAÇÃO

(a) Água na natureza



(b) Diagrama de fases

Figura 1: *A água é a única substância que se apresenta em três estados físicos nas condições de pressão e temperatura ambientes. Ela também possui um rico diagrama de fases, com fases líquidas e sólidas de diferentes densidades.*

MODELO

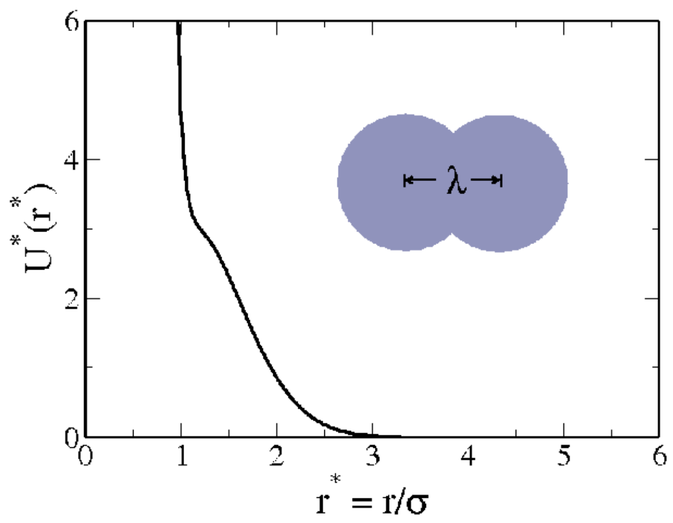


Figura 2: *Potencial contínuo de duas escalas com partículas diméricas.*

RESULTADOS - Diagrama de Fases

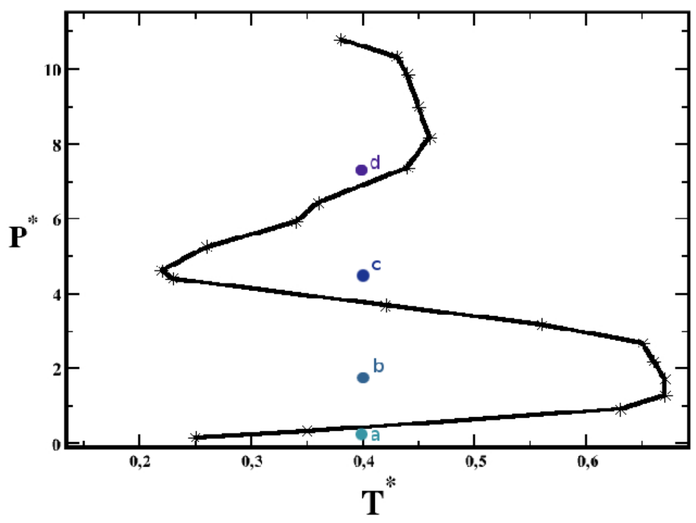
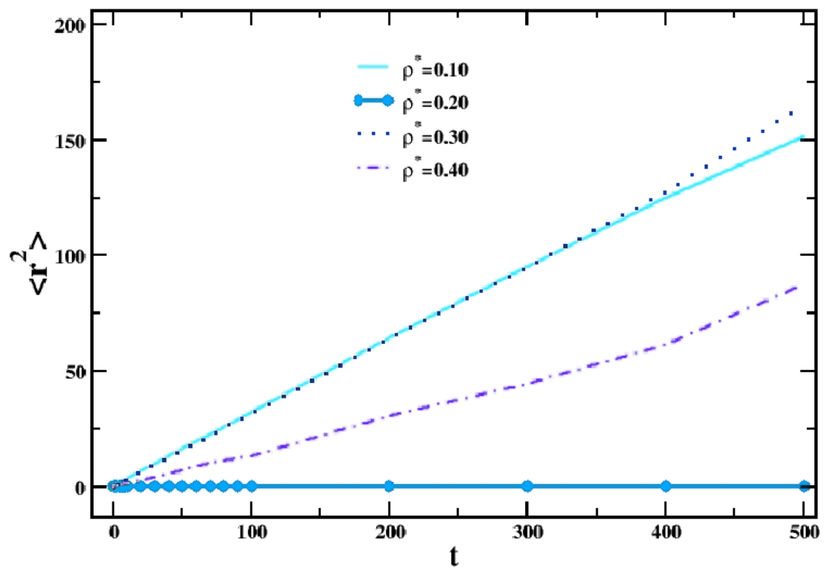
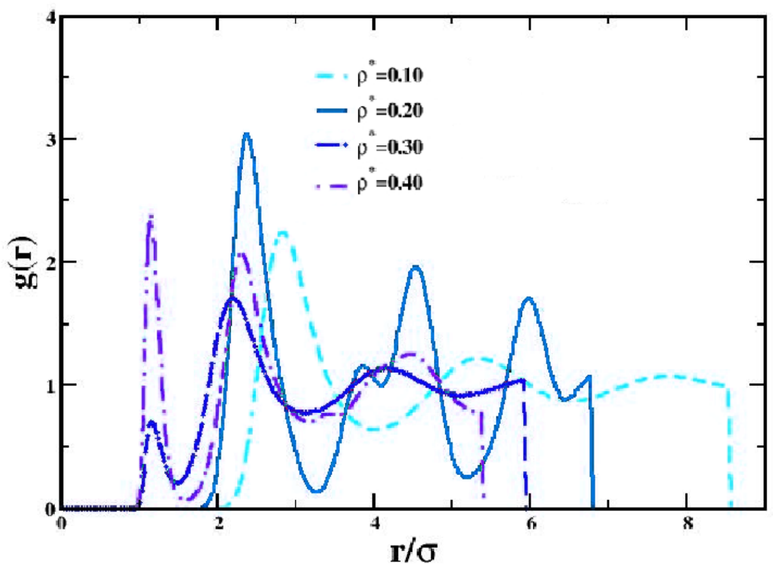


Figura 3: *Diagrama de fases do modelo, para λ = 0.20.*

RESULTADOS

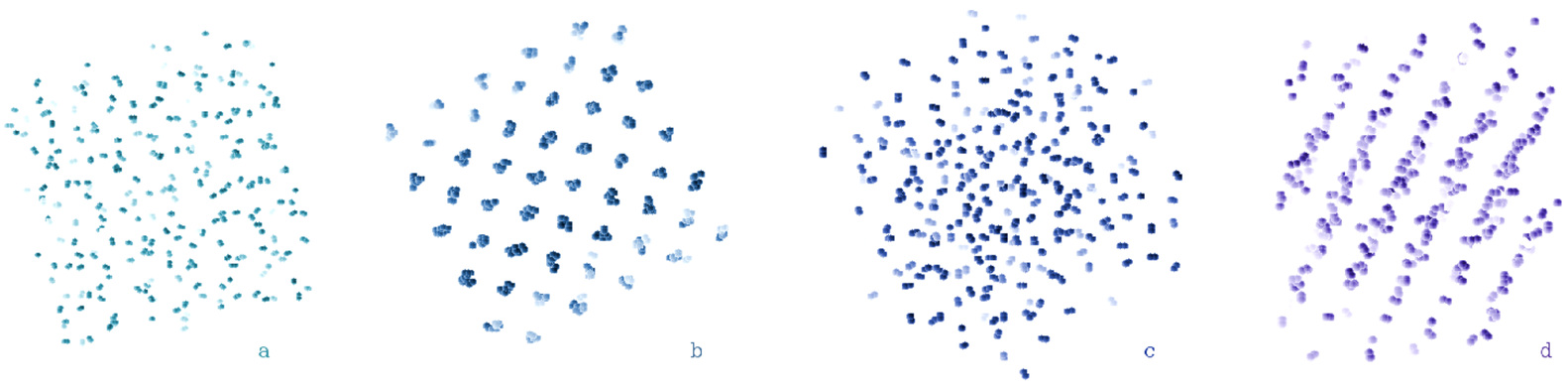


(a) Distância entre as partículas em função do tempo (r^2)



(b) Função de distribuição radial das partículas ($g(r)$)

Figura 4: *A inclinação de cada reta do gráfico (a) é diretamente proporcional ao coeficiente de difusão do sistema para a densidade correspondente, e o gráfico (b) mostra a probabilidade de se encontrar partículas por raio (em relação ao centro de uma partícula do sistema). A temperatura em ambos é 0.40.*



(a) fase líquida - ρ = 0.10 ; (b) fase sólida - ρ = 0.20 ; (c) fase líquida - ρ = 0.30 ; (d) fase de cristal líquido - ρ = 0.40

Figura 5: *A fase de cristal líquido - ρ = 0.40 - apresenta uma g(r) característica de sólido, com picos bem pronunciados (Figura 4 (b)) e uma alta mobilidade das partículas, como visto na Figura 4 (a).*