

Anomalias Dinâmicas em Sistemas de Dímeros

Apresentador: Laura Bottin Piovesan

Orientador: Marcia C. Barbosa

Estudamos um sistema de N partículas de diâmetro σ interagindo através de um potencial de duas escalas como um modelo simples para reproduzir as anomalias presentes na água. A primeira escala é um ombro repulsivo e a segunda um pequeno poço atrativo. Estas partículas formam dímeros distantes $\lambda\sigma$ em uma estrutura de um alteres interpenetrante. Usando dinâmica molecular no ensemble NVT e condições iniciais ordenadas (estado sólido) calculamos as propriedades da mobilidade deste sistema. Observamos que este sistema apresenta um coeficiente de difusão pouco usual. Como ocorre com água, para uma certa região de temperaturas o sistema difunde mais rapidamente ao se aumentar a densidade. Este comportamento é diferente do observado em outros líquidos onde a difusão aumenta com a diminuição da densidade. Este comportamento anômalo na difusão foi observado para valores de $\lambda = 0.1, 0.2, 0.5$. Mostramos igualmente que a região em temperatura compreendida entre a pressão de máxima difusão e de mínima difusão aumenta com a diminuição de λ .