



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2013
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Fase Sólida em Modelo de Duas Escalas
<b>Autor</b>	LUIZ FELIPE LICKS PEREIRA
<b>Orientador</b>	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

## Fase Sólida em Modelo de Duas Escalas

A água é um líquido complexo que apresenta uma série de comportamentos termodinâmicos diferentes dos outros materiais. Entre eles, apresenta uma série de fases sólidas que são reentrantes, ou seja, a fronteira entre a fase líquida e a sólida no diagrama de fases de pressão versus temperatura tem um formato reentrante.

Esta característica está ligada às anomalias presentes em água, particularmente a anomalia na densidade. Enquanto, para líquidos normais, a densidade aumenta com a diminuição da temperatura, para a água o comportamento é diferente. Sua densidade, a pressão ambiente, aumenta com a temperatura a partir de 0°C, apresentando um máximo a 4°C.

Para modelar tanto a anomalia como a forma reentrante da linha de fusão, usamos um potencial de duas escalas que é uma combinação de um Lennard-Jones e uma forma gaussiana. Em um primeiro momento reproduzimos a energia de um modelo de Lennard-Jones, e com ela vemos a fronteira de fusão. Em um segundo passo fazemos o mesmo para o modelo de duas escalas.