

CARACTERIZAÇÃO DA TRANSIÇÃO LÍQUIDO-LÍQUIDO

DAVI FELIPE KRAY SILVA¹; LEANDRO KROTT²; JOSÉ RAFAEL BORDIN³

¹Universidade Federal de Pelotas – davifelipe-ks@hotmail.com

²Universidade Federal de Santa Catarina – leandro.krott@ufsc.br

³Universidade Federal de Pelotas – jrbordin@ufpel.edu.br

1. INTRODUÇÃO.

Um grande desafio na área da matéria condensada é a caracterização de materiais polimórficos, especialmente em materiais com polimorfismo líquido. Dentre as substâncias que possuem esta propriedade destaca-se a água. A transição de fase líquido-líquido (LLFT) ocorre na região líquida super-resfriada da água, terminando em um ponto crítico líquido-líquido (LLCP) (BORDIN; KROTT (2023)). Este ponto crítico (ainda não obtido experimentalmente) é a hipótese mais aceita atualmente para a origem das mais de 72 diferentes anomalias da água (BARBOSA, 2015). Ainda, transições líquido-líquido não acontecem somente na água. Diversos estudos recentes tem relacionado a LLFT com diversas doenças neurológicas, câncer e mesmo COVID19 (TONG; TANG; XU; WANG; ZHAO; YU; SHI, 2022).

A forma de caracterização que propomos neste trabalho é modelar computacionalmente um líquido simples capaz de reproduzir as anomalias e o LLCP da água. A ideia é criar um ambiente virtual que consiga contemplar as interações físicas conhecidas da água entre uma quantidade considerável de partículas, para então, realizar o pós-processamento dos dados obtidos e os analisar, para enfim determinar se podemos identificar a transição de fase líquido-líquido e o ponto crítico LLCP.

Após a conclusão da etapa de pós processamento de dados, pretende-se expandir o trabalho, criando uma rede neural que seja capaz de identificar de forma autônoma transições líquido-líquido e o ponto crítico LLCP.

2. METODOLOGIA

Para descrever um fluído semelhante a água optamos pela utilização do potencial CSW, proposto por FRANZESE, 2007.

$$U^{CS}(r) = \frac{U_R}{1 + e^{\Delta(r-R_R)}} - U_A e^{\frac{-(r-R_A)^2}{2\delta_A^2}} + U_A \left(\frac{a}{r}\right)^{24}.$$

Com os parâmetros $U_R/U_A=2$, $R_R/a=1,6$, $R_A/a=2$, $(\delta_A/a)^2=0.1$ e $\Delta=15$. Esse potencial descreve um núcleo duro de diâmetro (a) com característica repulsiva. E uma casca mole de diâmetro ($2a$) de característica atrativa para partículas próximas.

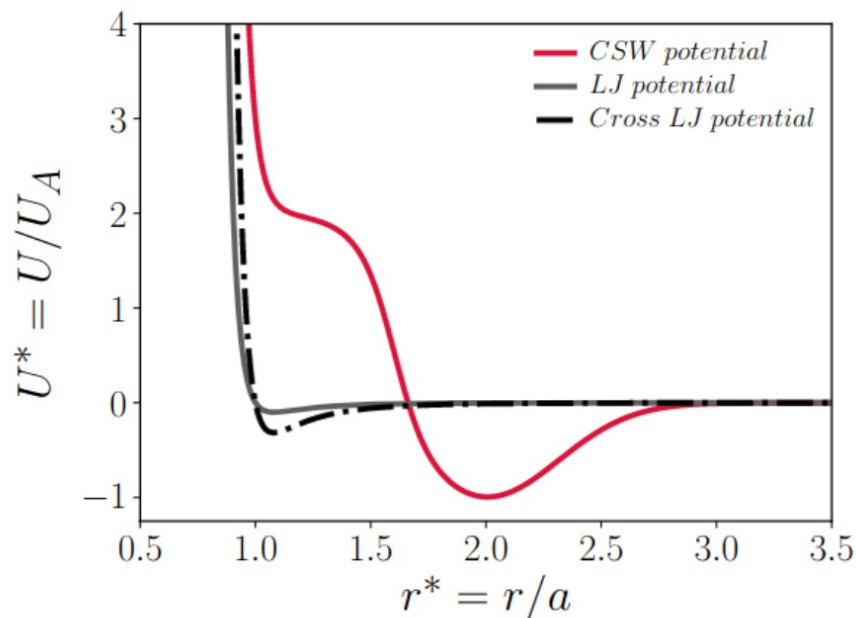


Figura 1 – Comparação entre o potencial CSW e o LJ.

Na linha vermelha, que descreve o potencial CSW, podemos ver que o potencial atrativo do núcleo duro e o repulsivo da casca mole criam uma competição entre duas conformações entre partículas, conforme se aproximam ou se distanciam umas das outras. Acredita-se que essas interações podem ser a origem de anomalias da água, conforme sugerido por MARQUES; HERNANDES; BORDIN (2021).

O software LAMMPS foi utilizado para elaboração da modelagem computacional do sistema, que além de utilizar o potencial CSW, considerou inicialmente 7000 partículas, com o sistema de unidades reduzidas LJ em uma caixa cúbica. A caixa no instante inicial possuía lados iguais de tamanho $L_x=L_y=L_z=30$ e temperatura $T=0,58$. Após 500 mil passos de simulação, adicionamos 3000 partículas ao sistema e a caixa foi estendida no eixo z em $L_z=50$, de maneira a evitar o congelamento das partículas e forçar a coexistência líquido-líquida no sistema (REGY, et al 2020).

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Até o momento, obtivemos perfis de densidade ao longo da direção z de algumas simulações testes. Alguns dos gráficos destes sistemas indicam a presença da coexistência líquido-líquido, conforme a figura abaixo.

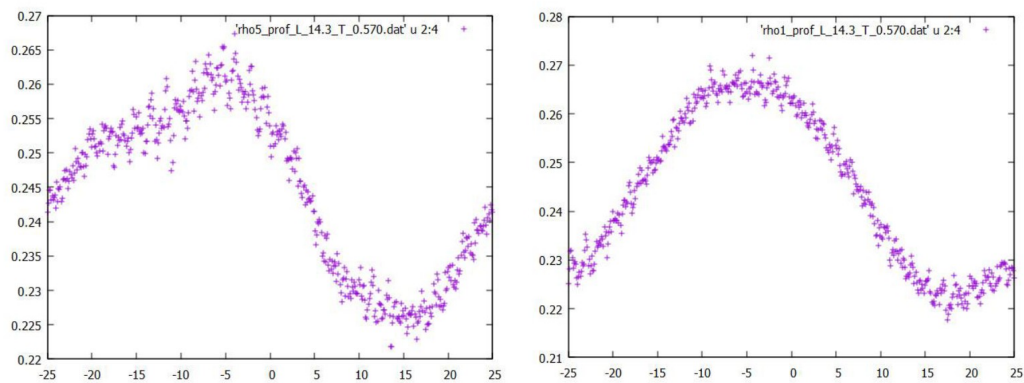


Figura 2 - Perfis de densidade de um sistema teste com coexistência líquido-líquido.

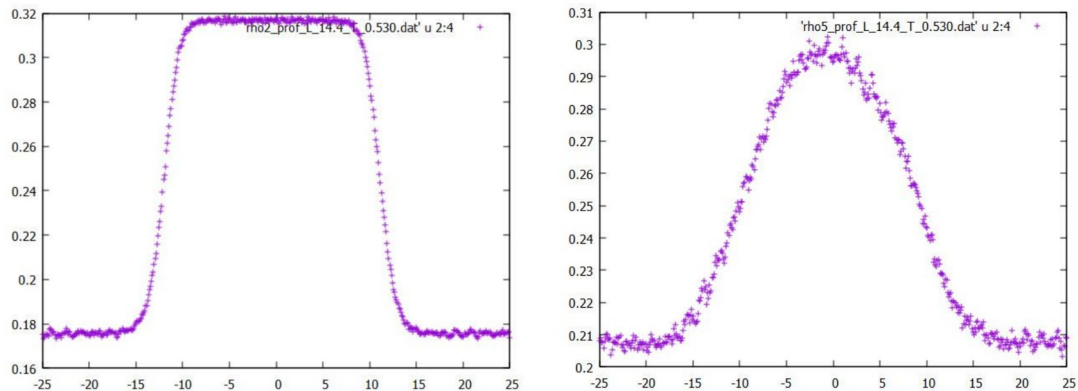


Figura 3 - Perfis de densidade de um sistema teste sólido-líquido.

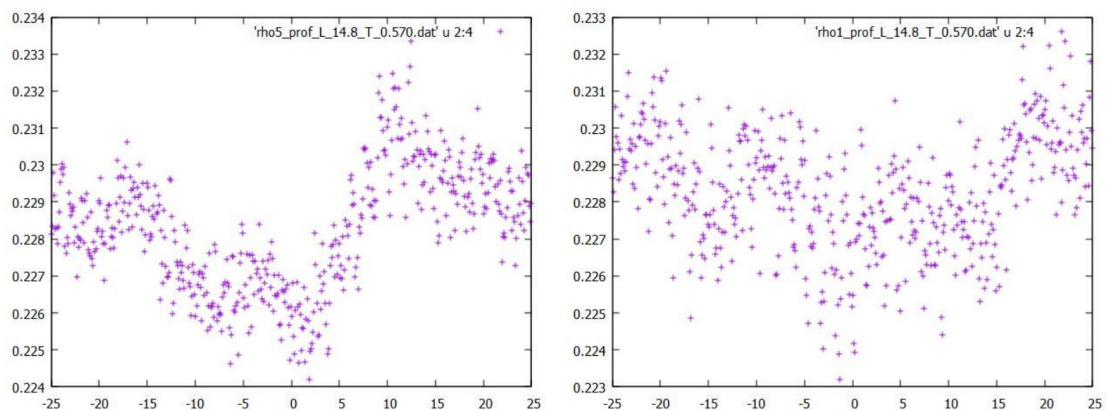


Figura 4 - Perfis de densidade de um sistema teste inconclusivo.

O próximo passo é analisar os sistemas que apresentaram a coexistência líquido-líquido mais detalhadamente, e entender uma forma simples de caracterização para então, se possível criar uma rede neural capaz de identificar a LLFT de qualquer sistema semelhante.

4. CONCLUSÕES

Neste trabalho pretendemos demonstrar a importância da investigação do fenômeno de coexistência líquido-líquido, que além de ser uma das possíveis causas da grande quantidade de anomalias da água, também pode estar associado ao surgimento de doenças degenerativas e câncer. Nossa compreensão sobre o assunto pode ser essencial para o desenvolvimento de fármacos mais eficazes e apropriados para esse tipo de situação.

Após a conclusão da etapa de pós-processamento, temos o objetivo de realizar então o treinamento de uma rede neural. Acreditamos que a aplicação das redes neurais para essa abordagem de categorização e identificação da coexistência líquido-líquido possa economizar muito tempo da etapa de pós processamento e também reduzir consideravelmente o custo computacional, agilizando o processo e nos permitindo trabalhar com uma quantidade significativamente maior de dados ou sistemas.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BORDIN, J. R; KROTT, L. B. (2023) Solid-amorphous transition is related to the waterlike anomalies in a fluid without liquid-liquid phase transition. **The Journal of Chemical Physics**, 158 (13).

BARBOSA, M. C. (2015) Aprendendo com as esquisitices da água. **E-boletim de Física**, eBFIS 4 5101-1.

TONG, X; TANG, R; XU, J; Et al. (2022) Liquid-liquid phase separation in tumor biology. **Sig Transduct Target Ther** 7, 221.

FRANZESE, G. (2007) Differences between discontinuous and continuous soft-core attractive potentials: The appearance of density anomaly, **Journal of Molecular Liquids** 136, 267 (2007), eMLG/JMLG 2006.

MARQUES, M. S; HERNANDES, V. F; BORDIN, J. R. (2021). Core-softened water-alcohol mixtures: the solute-size effects. **Physical Chemistry Chemical Physics** 23.