

Dinâmica Molecular de um Sistema Bidimensional – Mudança Estrutural Induzida por Aplicação de Pressão

Fernando Redivo Cardoso^{1*}, José Pedro Rino²

1. Estudante de IC do Departamento de Física – UFSCar, São Carlos/SP; *fernando.cardoso18@gmail.com

2. Pesquisador do Departamento de Física, UFSCar, São Carlos/SP

Palavras Chave: *Dinâmica Molecular, Parrinello-Rahman, Transição de Fase*

Introdução

Simulações computacionais dos mais variados sistemas têm um papel de grande importância na atualidade. A aplicação de ferramentas computacionais exerce papel fundamental no entendimento de sistemas com grande número de partículas, em especial, quando transições de fase e situações gerais de não-equilíbrio estão envolvidas. Neste trabalho, estudamos a transição de fase induzida por pressão em um sistema bidimensional. Sistemas bidimensionais podem exibir somente cinco possíveis estruturas cristalinas, a saber: quadrada, retangular, retangular centrada, hexagonal e oblíqua. A estabilidade de cada um destes tipos de rede cristalina depende de como as partículas que constituem o sistema físico interagem. Em nosso estudo, foi utilizado um potencial de interação com a mesma forma do potencial proposto por Lee *et al.*,¹. Inicialmente em estrutura quadrada, o sistema apresentou transição de fase para estrutura hexagonal quando pressão foi aplicada. Neste trabalho, foi utilizada dinâmica molecular clássica nos ensembles NVE (número de partículas, volume e energia constantes), e NPH (número de partículas, pressão e entalpia constantes). Para aplicação do método, foram utilizadas grandezas normalizadas e adimensionais, a fim de diminuir riscos de erro, *over* e *underflows* no programa, e as equações de movimento foram integradas com o algoritmo predictor-corrector de Gear em quarta ordem. Todas as grandezas normalizadas estão representadas com asterisco. Todos os *snapshots* foram gerados com o software ATOMEYE visualizador de configuração atômica de Li².

Resultados e Discussão

Inicialmente, a configuração do sistema, com 400 partículas, era de uma estrutura quadrada, com densidade $\rho^* = 0.8$, e temperatura $T^* = 10^{-3}$. Então, a temperatura do cristal foi aumentada de $T^* = 0.02$ a cada 2×10^4 passos de tempo, à volume constante. Pudemos identificar o ponto de fusão do sistema à $T^* = 0.62$. Para estudar a transição de fase induzida por aplicação de pressão, a configuração inicial foi de temperatura $T^* = 10^{-3}$, em estrutura cristalina quadrada. Então, a pressão foi aumentada de $P^* = 0.1$ a cada 2×10^4 passos de tempo. Quando o sistema atingiu a pressão $P^* = 9.7$, observou-se o início da transição de fase, e, à pressão $P^* = 10$, o cristal apresentava estrutura hexagonal, vide figuras 1 e 2, respectivamente.

Um dos principais fatores que colaboram para as transições entre estruturas observadas no estudo deve-se ao método de Parrinello-Rahman, em que a caixa que contém as partículas também é uma variável dinâmica, podendo alterar sua forma e tamanho dinamicamente durante toda a simulação.

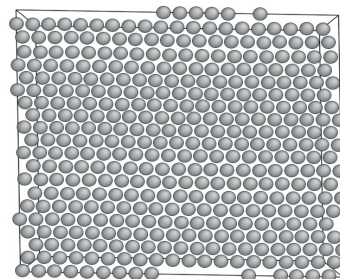


Figura 1. Representação do início da transição de fase.

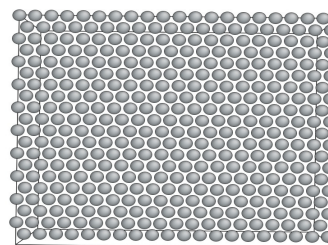


Figura 2. Estrutura hexagonal após a transição de fase induzida pelo aumento da pressão.

Conclusões

Neste trabalho, estudamos a transição de fase induzida por aplicação de pressão utilizando dinâmica molecular clássica. As partículas interagem através de um potencial de Lennard-Jones modificado.

Para valores baixos de pressão externa, o sistema mantinha-se em estrutura quadrada. Somente foi possível alcançar mudança na estrutura, de quadrada para hexagonal, quando um valor maior de P^* foi aplicado.

Os aumentos de valores de temperatura e pressão foram decisivos nas mudanças observadas no sistema durante a simulação, em ambos os ensembles utilizados, e, com a observação dos resultados, pode-se compreender melhor de que forma cada fator influencia na dinâmica do sistema, i.e., como as grandezas influenciam microscopicamente o movimento de cada partícula, enquanto interage com todas as outras.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

1. Lee, K. Y. e Ray, J. R., Phys. Rev. B 39, 565 (1989).
2. Li, J. Model. Simul., Mater. Sci. Eng. 11, 173 (2003).
3. Parrinello, M. and Rahman, A., Phys. Rev. Lett. 45, 1196 (1980).
4. Engel, M. e Trebin, H. R., Phys. Rev. Lett 98, 225505 (2007)
5. Sun, M. e Xia, Y. N., Science 298, 2176-2179 (2002)
6. Haile, J. M. e Graben, H. W., J. Chem. Phys. 73, 5 (1980)
7. Rino, J. P. e Costa, B. V.; "ABC da Simulação Computacional", Ed. Livraria da Física (2013).