

# Transição Sólido-Líquido em Sistemas com Interações tipo Lennard-Jones

D. L. Silva Júnior.; J. L. Cândido; N. T. Rabelo.

**Instituto de Física**

**Bolsista:** *domingosfis@hotmail.com*

**Orientador:** *jrabelo@fis.ufg.br*

**Palavras chaves:** Argônio, cristal, defeito, fusão.

## 1 Introdução

É impossível resolver analiticamente as equações de movimento para sistemas com elevado número de partículas. A física computacional usa modelos e métodos para descrever sistemas com muitos corpos através de simulações computacionais.

O nosso modelo consiste em uma rede cúbica de face centradas (fcc) com 256 átomos de Argônio. O passo inicial é o estudo do equilíbrio do sistema de partículas interagindo através de um potencial do tipo Lennard-Jones. Inicialmente estudamos a curva de dependência da energia em função da temperatura e determinamos a temperatura de fusão, para uma determinada densidade da substância. Posteriormente, variamos a densidade e estudamos o comportamento da temperatura de fusão. Simulada a transição tiramos um átomo da rede para simular um cristal com defeito de monovacância. Depois de introduzido o defeito simulamos a transição do cristal para comparar com a transição do cristal puro.

## 2 Metodologia

A Dinâmica Molecular(DM) é uma técnica para calcular as propriedades de equilíbrio e de transporte de um sistema clássico, que pode ter muitos ou poucos corpos.

O método de DM fornece trajetórias de fases clássicas de um sistema de partículas interagentes via um potencial bem conhecido. As trajetórias clássicas podem ser obtidas resolvendo-se as equações de movimento de Newton.

Em simulação devemos usar o tempo como sendo uma variável discreta. Existem vários algoritmos que utilizam o tempo como uma variável discreta. Em nossos cálculos, utilizamos o *algoritmo de velocidade de Verlet* [1].

O potencial usado é do tipo Lennard-Jones(LJ) que é dado por:

$$V(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

onde,  $\epsilon$ , é o mínimo do potencial.

A forma mais comum de minimizar os efeitos de superfície e simular melhor as propriedades de um grande sistema é usar o que é conhecido por *condições periódicas de contorno*.

A simulação por dinâmica molecular pode ser dividida em três partes: inicialização, termalização e observação dos resultados (cálculos das propriedades físicas de interesse).

### 3 Resultados e Discussão

As transições foram observadas através de uma descontinuidade no gráfico da energia em função da temperatura. Um exemplo deste gráfico pode ser visto na figura (1)

A linha tracejada na figura (1) mostra o intervalo de temperatura no qual o sistema se encontra num estado meta-estável. O cálculo da temperatura de fusão é feito usando-se o ponto médio de temperatura da região meta-estável. Os resultados obtidos para a transição foram colocados na tabela (1).

Um gráfico da temperatura de fusão em função da densidade do Argônio foi plotado e pode ser visto na figura (2). Este Gráfico mostra que há um grande aumento da temperatura de fusão com um pequeno aumento da densidade. Ou seja, a temperatura de fusão é muito sensível a mudança de densidade. Depois de ter simulado a transição para algumas densidades introduzimos um defeito no cristal e simulamos a transição. A temperatura de fusão do cristal com defeito para a densidade  $1,408 \text{ gcm}^{-3}$  é de  $51,85 \text{ K}$ . O valor da temperatura de fusão para a mesma densidade do cristal puro é  $59,76 \text{ K}$ . Apresentando assim uma diferença percentual de aproximadamente 13%. Já

densidade( $\text{gcm}^{-3}$ )	TF (K)
1,284	53,8
1,374	54,66
1,408	59,76
1,532	106,0
1,656	162,67
1,78	247,68

Tabela 1: temperatura de fusão (TF) em  $K$  em função da densidade em ( $\text{gcm}^{-3}$ ).

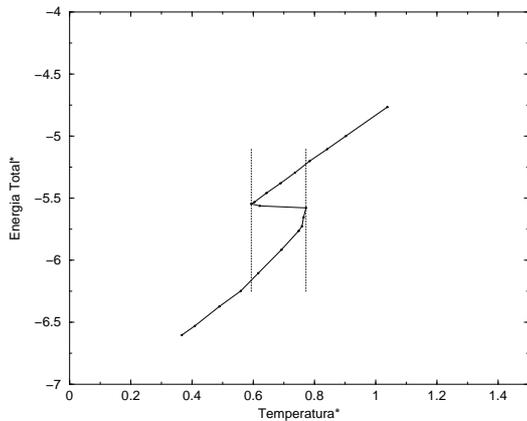


Figura 1: Energia em função da temperatura em unidades adimensionais (reduzidas).

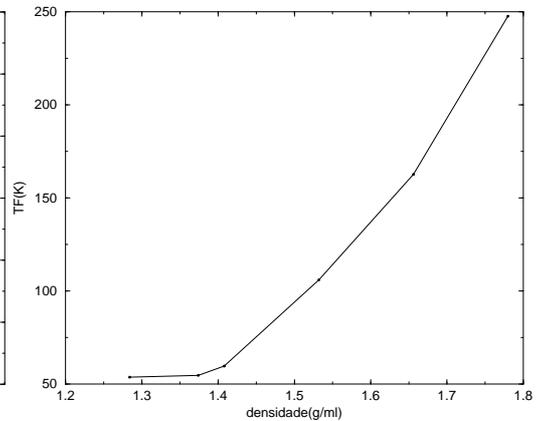


Figura 2: temperatura de fusão (TF) em  $K$  em função da densidade em  $(gcm^{-3})$ .

era esperado que a fusão ocorresse com uma temperatura menor para o cristal com defeito, pois quando o sistema atinge um estado meta-estável espera-se que o defeito possa provocar um desequilíbrio do sistema.

## 4 Conclusão

Apesar do trabalho ainda está em andamento, até agora percebe-se que a temperatura de fusão do Argônio cresce com o aumento da densidade. E para o sistema com defeito tivemos uma temperatura de fusão inferior à do puro. O que era de se esperar pois o cristal puro deve ser mais estável que o defeituoso.

## Referências

- [1] Frenkel, D. and Smit, B. (1996). *Understanding Molecular Simulation*, Ed. Academic Press, London.
- [2] Verseley, F. V. (1994). *Computational Physics an Introduction*, Ed Plenum Press, New York and London.
- [3] Allen, M. P. and Tildesley, D. J. (1987). *Computer Simulation of Liquids*, Ed. Clarendon Press, Oxford.
- [4] A. Rahman (1964), *Physical Review* Vol 136, pag. A405.

*Agradecimento ao órgão financiador pela bolsa: CNPQ*