

INTERAÇÃO DE DEFEITOS EM CRISTAIS DE GASES INERTES

COSTA, Lucas Modesto da¹; RABELO, José Nicodemos Teixeira².

Palavras-chave: Dinâmica Molecular, Defeitos, Duas Dimensões.

1. INTRODUÇÃO (justificativa e objetivos)

Neste trabalho analisamos o comportamento dos átomos em um cristal de Argônio, em duas dimensões, usando o método de Dinâmica Molecular. Para aproximarmos a nossa simulação da realidade, adicionamos defeitos que sempre estão presentes nos sólidos reais. Propriedades importantes dependem desses defeitos, como condutividade, cor, luminescência, entre outras. Calculamos a energia de formação de defeitos para diferentes amostras e estudamos os efeitos de interação e difusão.

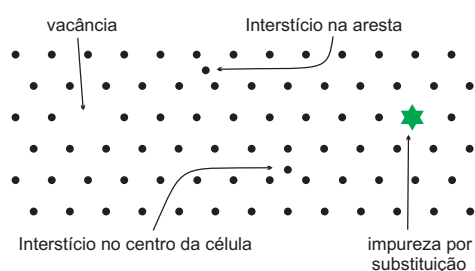


Figura 1: Alguns tipos de defeitos em cristais: **vacância** (falta de um elemento), **impureza de substituição** (elemento estranho em um sítio) e **interstício** (elemento comum fora de um sítio)

2. METODOLOGIA

2.1 - O Programa

O método da dinâmica molecular baseia-se na descrição microscópica de um sistema físico fornecendo trajetórias de fases clássicas de um sistema de partículas interagentes via um potencial bem conhecido. Em nossas simulações, utilizamos o *algoritmo clássico de Verlet* para calcular as posições e velocidades após um incremento de tempo (Δt) (ref. [1]). Usamos condições periódicas de contorno e para visualizar mudança de estado da amostra, implementamos a função de distribuição radial ($g(r)$) e o deslocamento quadrático médio (rms). Criamos uma função que descreve exatamente a posição das vacâncias usando parte do método do *poliedro de Voronoi* e checagem dinâmica dos vizinhos de cada elemento.

2.2 - Simulação

Semelhante ao experimento real, selecionamos a amostra e as condições do experimento, ou condições iniciais como temperatura, incremento de tempo, número de partículas, densidade, entre outros, para inserirmos em nossa simulação. Depois esperamos o tempo necessário para que sistema entre em equilíbrio. Este processo é executado integrando-se as equações de movimento clássicas. Para gerar os defeitos, retiramos um elemento para formar uma vacância ou adicionamos um elemento para formar um interstício. Depois corrigimos a caixa de modo que os dois sistemas, com e sem o defeito estejam à mesma densidade.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 - Rede Perfeita

Primeiramente, encontramos que a rede na configuração quadrada é mais instável que uma configuração triangular sob as mesmas condições. Depois, descobrimos o ponto de

¹Bolsista de iniciação científica. Instituto de Física. lucmod@gmail.com

²Orientador, Instituto de Física, UFG, jrabelo@if.ufg.br

fusão de uma amostra perfeita para comparar com as amostras com defeito. A faixa de temperatura que aparece no gráfico da energia 2(a) ocorre por que uma amostra que fundiu e é resfriada, não volta a sua estrutura inicial por ter rompido todas as suas ligações. Assim, a amostra desordenada possui uma energia maior precisando de uma temperatura bem mais baixa para se solidificar.

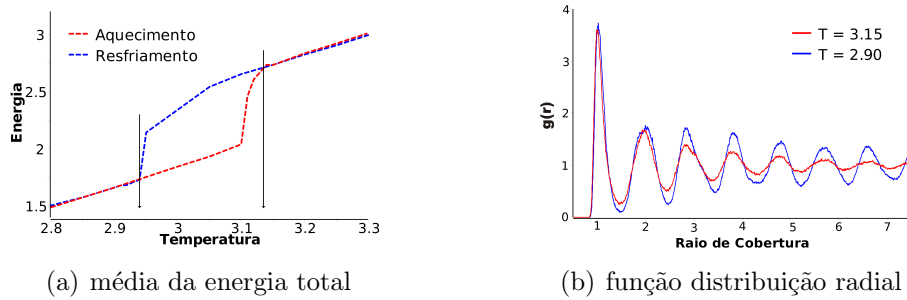


Figura 2: amostra com 256 partículas, densidade (ρ) igual a 1,0, Δt de 0,0005 e em torno de 10.000 passos para cada temperatura.

3.2 - Vacâncias

Para demonstrar como a energia de formação de um defeito varia com a densidade, mantendo a temperatura constante, montamos a figura 3(a). Observando a curva gerada, podemos concluir que é mais fácil produzir defeitos em cristais nas temperaturas próximas e um pouco abaixo do ponto de fusão. Calculamos também a interação entre duas vacâncias. Trabalhamos com diferentes amostras e sempre encontramos a mesma forma para a energia de um par ligado (ref. [2]). O fato da mesma ser negativa para apenas 1 parâmetro de rede, revela a atração existente entre as vacâncias separadas por essa distância. A figura 3(b) exibe um caso desse processo.

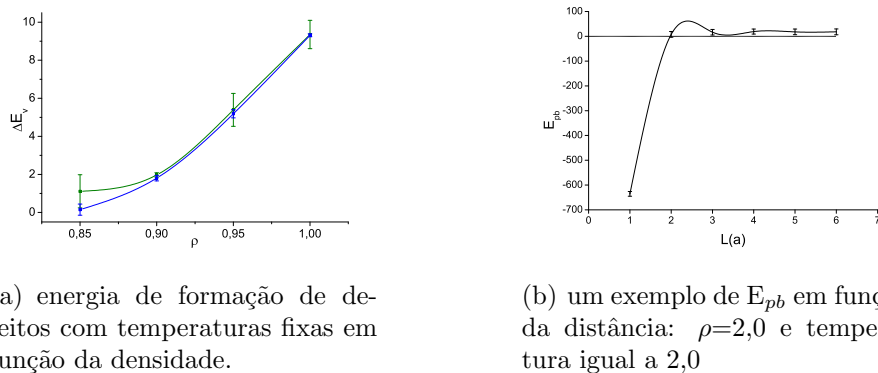


Figura 3: análise de defeitos pela energia

3.3 - Interstício

Tratamos dois tipos de interstícios: centro de rede triangular e centro aresta de rede. É fácil ver que a energia (ref. [2]) para formar um interstício é muito maior do que uma vacância, por isso é tão complicado encontrar amostras que suportam esse defeito. Para esses resultados (ver tabela abaixo), usamos $\rho = 0,9$, temperatura igual a 0,01 e 256 partículas (amostra perfeita).

Energia de formação para:	
uma amostra perfeita:	-3,7578
uma vacância:	1.9890
um interstício de centro de aresta:	12.6701
um interstício de centro de rede:	13.2869

3.4 - Difusão

Ao estudar a difusão de vacâncias (ref. [3]), devemos saber a posição da vacância e compará-la com a sua origem. Assim, traçamos a curva (figura 4) do deslocamento quadrático médio da vacância em função do tempo. Espera-se que aumentando a temperatura, aumentar-se á também a inclinação da curva linear que indica a média do *rms*.

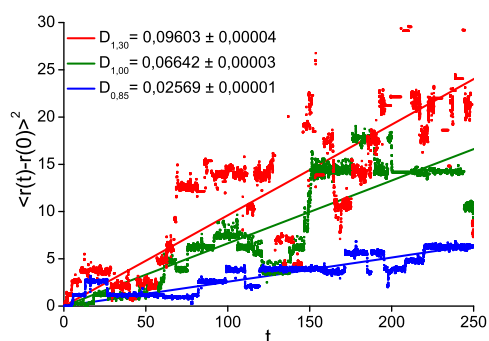


Figura 4: vemos claramente que a curva inclina cada vez mais com o aumento da temperatura.

4. CONCLUSÃO

Observamos que a rede quadrada é mais instável que a rede triangular. Ficou evidente que é mais fácil gerar vacâncias em temperaturas próximas do ponto de fusão, onde temos um aumento surpreendente de energia de formação cada vez que nos afastamos dela. Conseguimos provar que a interação entre duas vacâncias é atrativa apenas para pequenas distâncias, em torno de um parametro de rede. Ao estudar a difusão de defeitos, visualizamos como eles se afastam cada vez mais com o aumento da temperatura. A energia para gerar um interstício é bem maior do que para gerar uma vacância.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] RAPAPORT, D. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [2] SILVA, L. C.; PHILLIPS, P.; CEPERLEY, D. Single and Paried Point Defects in a 2D Wigner Crystal, *Physical Review Letters*, v.86, n.3, p.492-495, jan. 2001.
- [3] PERTSINIDIS, A.; LING, X. Diffusion of point defects in two-dimensional colloidal crystals, *Nature*, v.413, p.147-150, 13 set. 2001.

FONTE DE FINANCIAMENTO - CNPq/PIBIC