

MOLÉCULAS ARTIFICIAIS: UM ESTUDO POR DINÂMICA MOLECULAR

CARVALHO, Thiago Milograno de¹; CÂNDIDO, Ladir ².

Palavras-chave: Dinâmica Molecular, Moléculas Artificiais.

1. INTRODUÇÃO

Com o atual avanço na tecnologia de preparação e crescimento de materiais semicondutores e a manipulação de feixes de laser é possível atualmente aprisionar um número finito de elétrons ou íons em regiões pequenas. Essas armadilhas são criadas pela imposição de um potencial de confinamento artificial[4]. Como exemplo temos: elétrons confinados em bolhas e 'covas' sobre a superfície do hélio líquido e armadilhas a laser[3]. Neste trabalho estudaremos um sistema conhecido como moléculas artificiais clássicas simétricas, (esse tipo de sistema é formado por partículas carregadas interagindo coulombicamente e confinadas parabolicamente por um potencial externo de Yukawa) que consiste em dois átomos clássicos bidimensionais os quais são separados por uma distância d .

2. MODELO E MÉTODO NUMÉRICO

O sistema em estudo é conhecido como moléculas artificiais clássicas simétricas, cujas partículas dos átomos constituintes são livres para se moverem em duas dimensões. Como as partículas ("elétrons") possuem sinais iguais, um potencial harmônico mantém as partículas deste sistema juntas para formar os átomos que constituem a molécula, caso contrário, as cargas iriam se distanciar cada vez mais umas das outras desfazendo os átomos e conseqüentemente a molécula. Portanto, o papel principal do potencial harmônico neste sistema é semelhante a ação de um fundo uniforme de cargas positivas. A Hamiltoniana do sistema é dada por,

$$H = \sum_{i \in 1} r_i^2 + \sum_{i \in 2} \dot{r}_i^2 + \sum_{i < j \in 1} \frac{e^{-kr}}{r_{ij}} + \sum_{i \in 2} r_i^2 + \sum_{i \in 2} \dot{r}_i^2 + \sum_{i < j \in 2} \frac{e^{-kr}}{r_{ij}} + \sum_{i \in 1} \sum_{j \in 2} \frac{1}{r_{ij}}, \quad (1)$$

onde dois primeiros termos da lado direito da igualdade correspondem as energias cinéticas dos átomos 1 e 2, as somas em r_i^2 ao confinamento externo, os termos exponenciais $\frac{e^{-kr}}{r_{ij}}$ diz respeito a interação entre partículas em um mesmo átomo (potencial de Yukawa, onde k é a constante de blindagem) e o último termo, o somatório duplo, corresponde ao potencial interação entre as cargas nos diferentes átomos 1 e 2 respectivamente.

Neste trabalho, utilizamos o método de simulação conhecido como Dinâmica Molecular que consiste basicamente em fornecer trajetórias de fases clássicas de um sistema de partículas interagentes via um potencial bem conhecido. Se as posições das partículas são denotadas por \vec{r}_i , e a energia potencial do sistema por U as trajetórias clássicas podem ser obtidas resolvendo-se as equações de movimento de Newton:

$$m_i \ddot{\vec{r}} = -\vec{\nabla}_i U_i \quad (2)$$

onde m_i representa a massa da partícula i e $\ddot{\vec{r}}$ a derivada segunda com relação ao tempo e i varia de um até N onde N é número de partículas. Para evoluir as equações de movimento utilizamos o algoritmo *predictor – corrector* de Gear de quinta ordem[5] utilizando passos de tempo variando desde 10^{-2} a 10^{-4} em unidades reduzidas. As médias estatísticas das quantidades físicas de interesse foram realizadas considerando 150.000 passos de integração durante a evolução do sistema em equilíbrio termodinâmico.

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

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

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Estudamos os efeitos da blindagem na interação elétron-elétron em um átomo isolado e depois na molécula constituída por dois átomos. As figuras mostram: Fig. 1(a) configuração do estado fundamental de um átomo ($d = 0$) e 1(b) de uma molécula ($d = 2.0$), ambas constituídas de 30 elétrons com a interação elétron-elétron sujeitas à diferentes valores do parâmetro de blindagem. Como pode observado na Fig. 1(a) no estado funda-

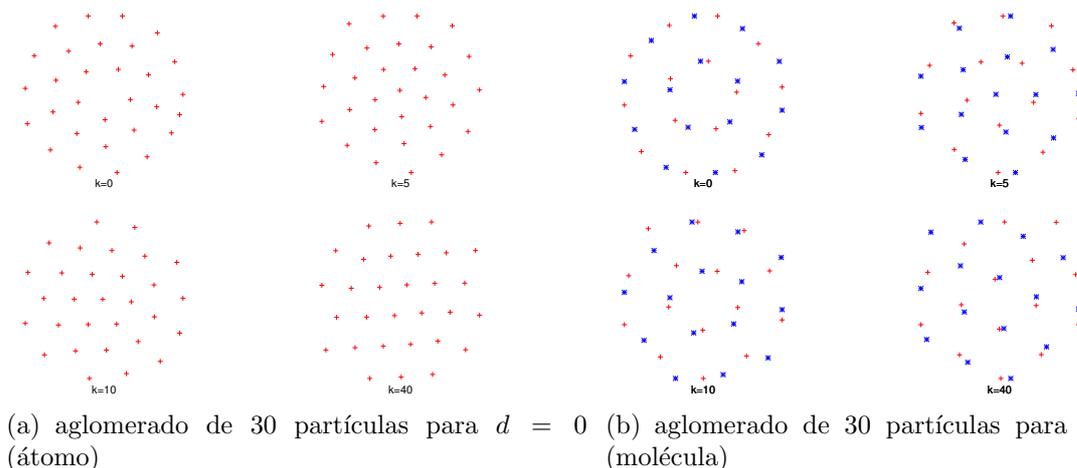


Figura 1: Aglomerado com 30 partículas para $d=0$ e $d=2.0$.

mental os elétrons se rearranjam numa estrutura de camadas bem definida com 15 elétrons na primeira camada (camada externa), 10 na camada intermediária e 5 na camada interna de acordo com resultados conhecidos[2]. Para melhor caracterizar a distribuição e o arranjo dos elétrons no átomo, calculamos a função distribuição angular Fig. 2(a) e radial 2(b). A função distribuição radial nos fornece a distância precisa dos raios das

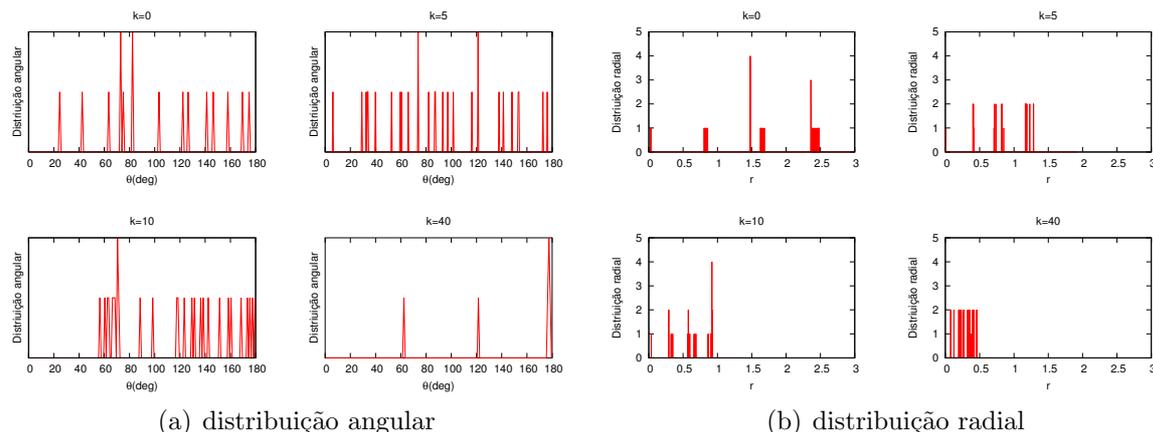


Figura 2: distribuições angular e radial para o átomo para diferentes valores de blindagem.

camadas em relação ao centro do confinamento, como pode ser observado na Fig. 2 (b) para diferentes valores de κ , e é também evidente no gráfico que o aglomerado diminui de tamanho em função do parâmetro de blindagem, isto é bem razoável uma vez que a blindagem encurta a interação elétron-elétron permitindo que eles se aproximem mais um do outro a medida que aumentamos κ . Com o aumento do parâmetro de blindagem é claro das Fig. 1(a) e 1(b) que estrutura de anéis é destruída. Para verificar como as

partículas se rearranjam após a destruição da configuração das camadas, utilizamos a função distribuição angular Fig. 2(a). Como pode observado nesta figura à medida que aumentamos κ a distribuição de ângulos tende a se estabelecer em torno dos ângulos 60, 120 e 180 graus que são correspondentes a uma rede triangular, ou seja, isto significa que este sistema apresenta uma transição de uma estrutura de camadas para um rede triangular (rede de Wigner)[1] em função do parâmetro de blindagem. Em seguida passamos a estudar a molécula. A Fig. 1(b) mostra as configurações do estado fundamental de uma molécula constituída de 30 elétrons projetada no plano. A distância entre átomos está fixada em $d = 2.0$ em unidades reduzidas e os pontos vermelhos e azuis correspondem a elétrons em átomos diferentes. Calculamos as funções distribuição angular, Fig. 3(a) e radial, Fig. 3(b) para a molécula. O comportamento das distribuições é bem parecido, mas notamos que a blindagem tem um efeito menor na molécula devido ao acréscimo de interação coulombiana, entre os átomos, o que contribui para a estabilidade da molécula. Isso pode ser observado na Fig. 3(a), que mesmo para $\kappa = 40$, ainda não temos uma rede perfeita.

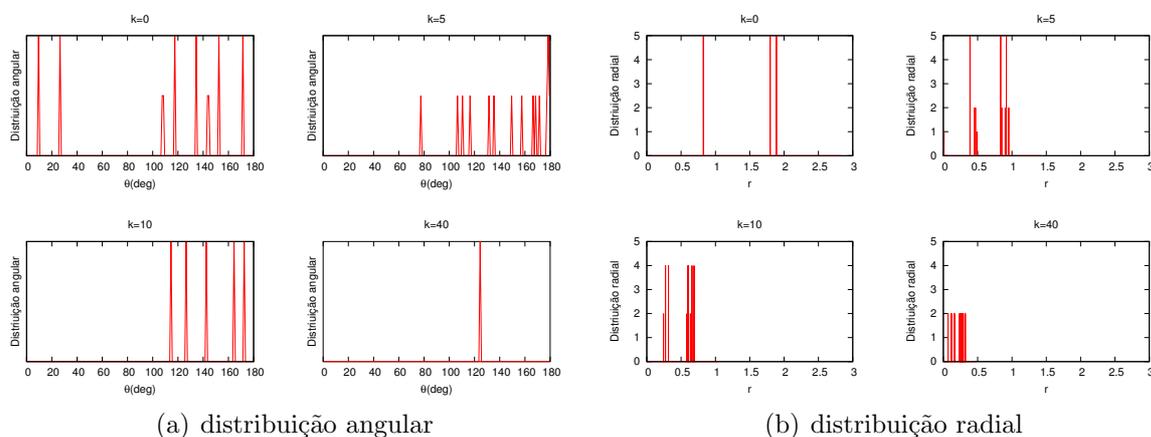


Figura 3: distribuições angular e radial para a molécula para diferentes valores de blindagem.

4. CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentamos resultados para um sistema contituído de uma molécula artificial clássica simétrica (formada por dois átomos artificiais) usando o método da Dinâmica Molecular. Tanto para o átomo isolado quanto para a molécula os resultados obtidos, mostram que a influência da blindagem reduz o tamanho do átomo, levando-o a uma transição de uma estrutura de camadas para uma rede de Wigner (rede triangular) bidimensional. Calculamos as funções distribuição radial e angular, o que nos permitiu fazer uma análise mais detalhada da redistribuição das cargas em função do parâmetro de blindagem na estrutura do átomo e da molécula.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Wigner, E. P., Phys. Rev. B, Vol. 46, pág. 1002 (1934).
- [2] Benadov, V. M. e Peeters, F. M. Phys.Rev. B, Vol. 49, pág. 2667 (1994).
- [3] Koulakov, A.A, Schweigert V.A and Peeters F.M. Phys. Rev. B, Vol. 56, 2352 (1998).
- [4] B. Partoens, V.A.Schweigert and F.M. Peeters Classical double-layer atoms: artificial molecules, Phys. Rev. Lett. Vol. 79, pág. 39990 (1997).
- [5] Gear, C. W., Num. Init. Value, Problem in ordinary diferencial equation, N.J. (1971)

FONTE DE FINANCIAMENTO - CNPq/PIBIC