

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC
EN 2809 - TÓPICOS COMPUTACIONAIS EM MATERIAIS - LABORATÓRIO
DINÂMICA MOLECULAR 2

INTRODUÇÃO

Uma das áreas mais importantes da ciência e engenharia de materiais é o estudo das transformações de fase de um material. O conhecimento destas transformações, tanto do ponto de vista termodinâmico quanto cinético, permitem controlar a microestrutura de um material e portanto suas propriedades. Nesta área podemos encontrar diversos exemplos de aplicações de técnicas computacionais para o estudo destas transformações. Nesta aula trataremos especificamente da fusão (que é um exemplo de transição de 1ª ordem ou transição contínua) de um sólido por meio da dinâmica molecular.

Uma maneira, não muito precisa, de determinarmos a temperatura de fusão de um sólido consiste em monitorar como a energia do sistema varia em função da temperatura a partir de simulações de um sistema em diferentes condições termodinâmicas. Quando um material passa do estado sólido (ordenado) para o estado líquido (desordenado) ocorre uma liberação de energia, o chamado calor latente de fusão, o que provoca uma descontinuidade no gráfico $E \times T$. A temperatura na qual esta descontinuidade ocorre pode ser utilizada como uma estimativa da temperatura de fusão do sólido.

TAREFA 01: obter e compilar os programas crystal e md1

Os códigos-fonte dos programas utilizados nesta aula foram desenvolvidos por Furio Ercolessi. Os programas originais podem ser obtidos livremente no endereço:

<http://www.fisica.uniud.it/~ercolessi/md/f90/>

Para compilar o programa crystal digite no terminal:

```
gfortran -o crystal crystal.f90
```

Para compilar o programa md1 digite no terminal:

```
gfortran -o md1 md1.f90
```

Se não houve problema com a compilação você deve ter dois arquivos executáveis crystal e md1. Para verificar digite no terminal:

```
ls
```

TAREFA 02: criar um sólido de Lennard-Jones (CFC) com o programa crystal

Ainda no terminal digite:

```
./crystal
```

O programa crystal é um programa interativo que pede que o usuário forneça algumas informações. Utilize 07 células em cada uma das direções x, y e z e deslocamento máximo de 0.001. Salve o arquivo com as posições dos átomos (ex. "coordenadas.cry"). Este arquivo será utilizado em todas as simulações desta aula.

TAREFA 03: análise da variação de energia

Execute simulações com o programa md1 a partir do arquivo gerado na tarefa anterior para as seguintes condições termodinâmicas:

densidade	= 0.9 (constante em todos os casos)
temperatura	= 0.7 0.8 0.95 1.10 e 1.20 (constante em cada simulação)
passo de integração	= 0.0025
número de passos	= 10.000 (mínimo)

Para executar o programa md1 é necessário criar um arquivo de entrada com as condições acima (observe que cada condição indicada acima corresponde a uma simulação).

Utilize o exemplo abaixo para criar o arquivo de entrada.

T* = 0.7 rho* = 0.9	(linha de comentário)
rho09.inicial.cry	(nome do arquivo de entrada)
rho09.T07.anneal.md1	(nome do arquivo de saída)
20000	(número de passos de integração)
0.0025	(passo de integração)
0.9	(valor da densidade)
0.7	(valor da temperatura)

Para executar o programa md5 digite no terminal:

```
./md1 < input > output
```

onde input é o nome do arquivo que contém parâmetros de simulação e output é o nome do arquivo onde os dados de temperatura, energia etc. serão gravados.

QUESTÕES

1. Trace o gráfico da energia potencial em função do número de passos para todas as condições acima. Discuta os resultados obtidos:
2. Qual é o comportamento observado para a energia? Qual a razão deste comportamento? A variável tempo deve ser incluída na análise do comportamento observado?
3. Trace o gráfico da energia potencial média em função da temperatura para as condições acima. Qual é a estimativa para a temperatura de fusão do sólido?
Se achar necessário, realize novas simulações para valores intermediários de temperatura.