

Estudo computacional do efeito do meio compressor em nanotubos de carbono.

Antonio Lívio de Sousa Cruz (aluno de ICV/UFPI), Acrísio Lins de Aguiar(Orientador, Departamento de Física - UFPI)

Introdução

É de importância para a ciência o estudo das características da matéria, como por exemplo, os seus estados sólido, líquido e gasoso, e como se encontra o ordenamento espacial dos seus constituintes. A simulação feita por computadores é um método utilizado para compreender as propriedades dessa matéria[1].

No método da dinâmica molecular, as leis de Newton são aplicadas em átomos ou moléculas – desprezando os efeitos quânticos – para que seja obtida a trajetória de um certo número de partículas em um dado tempo, e assim calcular as propriedades de interesse do sistema. As simulações computacionais são importantes também por poderem reproduzir cenários difíceis, ou até mesmo impossíveis de serem reproduzidos por experimentos comuns.

Uma das ferramentas que podemos utilizar para investigar o ordenamento do sistema é a função radial de pares. Neste trabalho iremos ilustrar o cálculo desta função $g(r)$ para o Argônio. Os aspectos essenciais deste sistema são razoavelmente bem capturados pelo modelo Lennard-Jones. A descrição de fluidos e sólidos, em algumas situações, deve ser feita em duas dimensões como, por exemplo, quando estão sendo investigados filmes finos[1]. As simulações bidimensionais, por exigirem poucos recursos computacionais e facilitarem a visualização gráfica de certas quantidades físicas, se tornam muito convenientes. Mas neste caso faremos uma simulação tridimensional, que seria de uma caixa cúbica contendo tal elemento.

Metodologia

Daremos início a uma introdução ao potencial que descreve a interação entre as partículas, o potencial de Lenard-Jones. A seguir discutiremos a teoria sobre a função radial de pares $g(r)$. Logo após, podemos apresentar os conceitos que servem de base para a dinâmica molecular, abordando os algoritmos a serem usados, que englobam o cálculo das posições e velocidades das partículas, da força que é entre elas que é aplicada pelo próprio potencial, podemos definir a

energia cinética e temperatura do sistema e as condições periódicas de contorno e a convenção da mínima imagem.

Resultados e Discussões

Ao começarmos a construir o código responsável pela simulação deste fluido, primeiro nos preocupamos em randomizar as posições das partículas utilizando um código capaz de gerar números aleatórios de modo que pudemos aproximar mais o sistema de uma situação real, além disso, foram inseridas as condições periódicas de contorno para que uma divergência de um sistema real caso fossem inseridas reflexões nas paredes. Após isso, concluimos as metas previstas para a conclusão momentânea do código de modo que foi realizada a simulação de um sistema com 50 moléculas de argônio, como pode ser visto na Fig. 1.

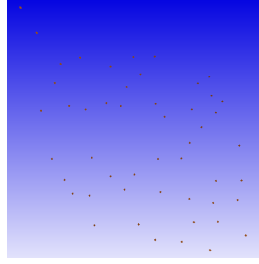


Figure 1: Sistema simulado de 50 partículas.

Somos capazes de colher informações importantes como a evolução da temperatura do sistema com o passar do tempo, utilizando diferentes velocidades para as partículas, como demonstrado a Fig. 2, de modo que isto pode nos dizer se o sistema simulado está conforme um sistema real, a energia cinética do mesmo e aceleração de cada partícula. Com base no Potencial de Lennard-jones descrito na eq. 1,

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

pudemos obter as forças que ocorrerá entre as partículas como visto na eq. 2.

$$F(r) = -\nabla V(r) = \frac{24\epsilon}{r} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \hat{r}, \quad (2)$$

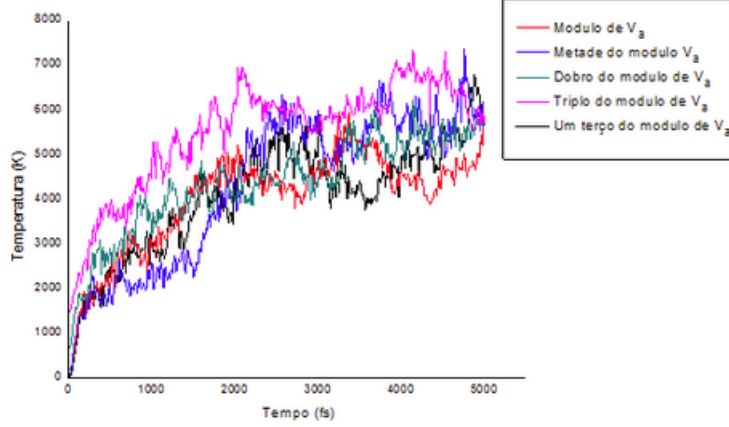


Figure 2: Evolução da temperatura do sistema com 50 partículas em função do tempo em diferentes velocidades, sendo V_a a velocidade do argônio.

Utilizando o algoritmo de Verlet que determina o cálculo que deverá ser feito para simularmos a posição e velocidade de cada partícula, nos foi fornecido por este, tais equações

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) - r(t - \Delta t) + a(t)\Delta t^2 + O(\Delta t)^4 \quad (3)$$

e também sua velocidade $v(t)$:

$$v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t}, \quad (4)$$

as quais foram descritas em linguagem Fortran 90 para efetuar a simulação desejada.

Conclusões

Diante do que foi proposto, pode-se concluir que o estudo do potencial de interação entre partículas e a função radial de pares é essencial para quem deseja realizar uma simulação de um sistema real. O algoritmo de verlet é eficiente quando se trata de simular o movimento das partículas de um gás, possibilitando assim um estudo que envolve, força, energia cinética, temperatura, como foi visto neste relatório, e pressão em uma estrutura imersa nesse mesmo gás. Tudo o que pudemos realizar até agora é um meio no qual podemos colocar uma estrutura imersa nele, para que se possam futuramente serem estudados os efeitos que esse meio poderá causar em tais estruturas.

Referências

- [1] MADEIRA, Lucas. A função radial de distribuição de pares para sistemas Lennard-Jones bidimensionais, 2012.
- [2] NAMBA, A. M; DA SILVA, V. B. Dinâmica molecular: teoria e aplicações em planejamento de fármacos, 2008.
- [3] M. P. Allen and D. J. Tildesley. Computer Simulation of Liquids (Clarendon Press, Oxford, 1989).
- [4] OLIVERIA, R. C. M. T. Transformação estrutural induzida por pressão: um estudo por dinâmica molecular, 2002.