



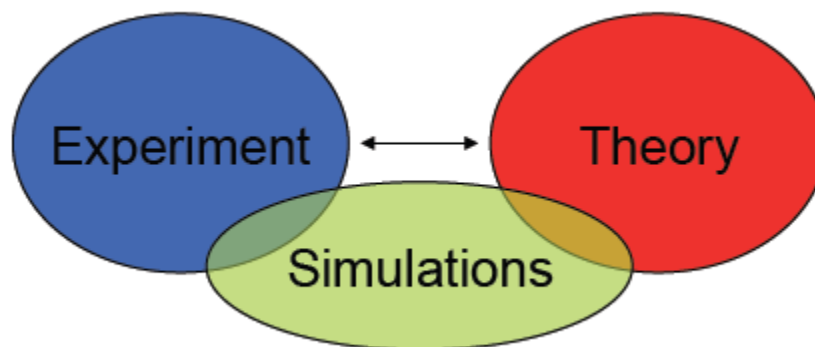
Aula 01 – Bases da Dinâmica Molecular



I – Introdução: Simulações Computacionais

Simulações Computacionais

Nas últimas décadas, as simulações computacionais se firmaram como uma importante ferramenta de estudo, quer para testar teorias, quer para entender as propriedades da matéria em condições não acessíveis aos experimentos.



As simulações computacionais hoje constitui um campo complementar à teoria pura e a experimentação.

As Simulações e Suas Escalas

Em cada exemplo dado, os processos envolvidos ocorrem dentro de uma determinada escala de tamanho. A grosso modo, as simulações das propriedades da matéria se dividem nas seguintes escalas:

- **Macroscópica:** aqui encontram-se as simulações computacionais dos processos siderúrgicos, hidrodinâmica, meteorologia, órbita de corpos celestes, etc...
- **Mesoscópica e Microscópica:** textura de materiais, solidificação, recristalização, polímeros, magnetismo, etc...
- **Nanoscópica ou Atomística:** reações químicas, difusão, etc...

As simulações atomísticas podem fornecer parâmetros de entrada (*input*) para as simulações nas outras escalas, quando houver carência de dados experimentais.

Em que escala estamos mesmo?

No sistema MKS, as grandezas fundamentais são a massa (Kg), o tempo (s) e a distância (m). As demais grandezas são derivadas desta fundamental, como o Joule (J) = $Kg \times m^2/s^2$. Assim:

$$t = \sqrt{\frac{m \cdot d^2}{\mathcal{E}}}$$

Na escala atômica, os comprimentos são dados em angstroms (10^{-10} m), a energia em elétronvolts ($1,6 \times 10^{-19}$ J) e a massa típica seria a de um próton ($1,67 \times 10^{-27}$ Kg). Deste modo, a escala de tempo seria dada por:

$$t = \sqrt{\frac{1,6 \times 10^{-27} \times (10^{-10})^2}{1,6 \times 10^{-19}}} \approx 1 \times 10^{-14} s$$

Descrição Mecânica de um Sistema

Na mecânica Clássica, a partir do conhecimento das posições $\{\mathbf{r}_{0i}\}$ e e velocidades iniciais $\{\mathbf{v}_{0i}\}$ dos átomos, bem como das leis de força sob as quais estão submetidos, a evolução temporal do sistema é obtida a partir da integração da 2a Lei de Newton:

$$\vec{F}_i = m_i \vec{a}_i = m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} \mathbf{v}_i(t) &= \mathbf{v}_{0i} + \int_0^t \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)}{m_i} dt \\ \mathbf{r}_i(t) &= \mathbf{r}_{0i} + \int_0^t \mathbf{v}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) dt \end{aligned}$$

PROBLEMA: as equações acima são solúveis apenas nos casos $N = 1$, $N = 2$ e para alguns casos com $N = 3$ (problema de três corpos de Lagrange).

Do Microscópico para o Macroscópico

Numa simulação típica, as propriedades físicas do sistema (energia, pressão, temperatura, etc....) são obtidas na medida que o mesmo evolui dinamicamente. Podemos colocar as seguintes questões:

- Qual a relação entre as propriedades calculadas com as medidas experimentais?
- Pode um sistema composto por poucos átomos simular o comportamento macroscópico de sistemas reais, com $N \sim 10^{23}$?

Como a escala típica dos processos atômicos é muito menor que a escala de tempo macroscópica, medidas experimentais correspondem à médias temporais de grandezas microscópicas.



II – Bases da Dinâmica Molecular

O Que é Dinâmica Molecular?

De certa forma, a dinâmica molecular é a realização do sonho de Laplace, onde o computador faz o papel da tal inteligência por ele referida. É um método de simulação computacional de sistemas na escala atômica, onde:

- O movimento de cada átomo é governado pela Segunda Lei de Newton;
- As velocidades e posições em função do tempo são obtidas via integração numérica das equações de movimento;
- As propriedades físicas do sistema são obtidas via média temporal dos respectivos valores ao longo da simulação.

O Que faz Uma Simulação de Dinâmica Molecular?

A partir de certos vínculos impostos, que se traduz na constância de certas grandezas físicas (temperatura, volume, pressão, ...), gera sucessivos microestados encadeados temporalmente, para os quais pode ser calculadas várias grandezas físicas instantâneas, cujo correspondente macroscópico será dado pela média das propriedades instantâneas:

$$\{\vec{r}_i, \vec{v}_i\} \Rightarrow \begin{cases} E_i = U_i + K_i \\ P_i \\ T_i \end{cases} \Rightarrow \bar{A} = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} A(t) dt \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i$$

Como Faz?

Resolução direta das equações de Newton, para cada átomo, através do método de diferenças finitas:

$$\mathbf{F}_i = m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \Rightarrow \mathbf{F}_i \approx m_i \frac{\Delta\mathbf{v}_i}{\Delta t}$$

A escolha de um passo de integração Δt coerente é fundamental!

“Receita” para Dinâmica Molecular

- Escolha de um potencial de interação entre os átomos;
- Escolha de um método de integração das equações de Movimento;
- Cálculo das médias das grandezas físicas.

Diferenças Finitas: Método de Verlet

Expansões de Taylor:

$$\left. \begin{aligned} x(t + \Delta t) &= x(t) + \frac{dx(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 x}{dt^2} \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3 x}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \\ + \\ x(t - \Delta t) &= x(t) - \frac{dx(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 x}{dt^2} \Delta t^2 - \frac{1}{3!} \frac{d^3 x}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \end{aligned} \right\} \Rightarrow x(t + \Delta t) = 2x(t) - x(t - \Delta t) + \frac{d^2 x}{dt^2} \Delta t^2$$

Diferente do método de Euler, a posição futura da partícula depende tanto da posição atual como a do passo anterior.

Velocidade:

$$v(t) = \frac{x(t + \Delta t) - x(t - \Delta t)}{2\Delta t}$$



II – Laboratório: Iniciando um Programa de Dinâmica Molecular

Algoritmo Básico de Dinâmica Molecular

Inicialização

Definição dos parâmetros da Simulação: N , ρ e T
Definição das Posições Iniciais
Definição das Velocidades Iniciais

Equilibração

Integração das Equações de Movimento dos Átomos NPEQ vezes, até as grandezas físicas como a temperatura, pressão e energia total flutuarem em torno de valores médios compatíveis com as condições iniciais.

Produção

NPPD Integrações das Equações de Movimento: cálculo das grandezas de interesse.

Inicialização do Programa

Inicialização

Definição dos parâmetros da Simulação: N , ρ e T

Definição das Posições Iniciais

Definição das Velocidades Iniciais

Definição dos parâmetros de interações e sistema de unidades

Sabendo que no equilíbrio termodinâmico as posições e as velocidades das partículas serão insensíveis aos valores iniciais, podemos colocar as questões:

- Como posicionar inicialmente os átomos?
- Como atribuir as velocidades iniciais?
- Como os átomos irão interagir entre si?

Programação FORTRAN: Functions e Subrotinas

O FORTRAN tem duas estruturas de subprograma: as **functions** e as **subrotinas**. Eles destinam-se a racionalizar a estruturação do programa.

- Um *function* retorna um valor numérico quando é chamada;
- Uma subrotina (*subroutine*) consiste num conjunto estruturado de procedimentos que pode retornar várias coisas.

Sintaxe de Uma *Function*

Uma *function* recebe um ou vários argumentos e retorna um valor numérico calculado a partir deles. Sua seguinte sintaxe:

```
type FUNCTION function-name (arg1, arg2, ..., argn)
  IMPLICIT NONE
  [specification part]
  [execution part]
  [subprogram part]
END FUNCTION function-name
```

No exemplo ao lado temos uma *function* que retorna o fatorial de um número inteiro n . Para chamá-la do programa, faça **fat = fatorial(n)**.

```
INTEGER FUNCTION Factorial(n)
  IMPLICIT NONE
  INTEGER, INTENT(IN) :: n
  INTEGER :: i, Ans

  Ans = 1
  DO i = 1, n
    Ans = Ans * i
  END DO
  Factorial = Ans
END FUNCTION Factorial
```

Sintaxe de Uma *Subroutine*

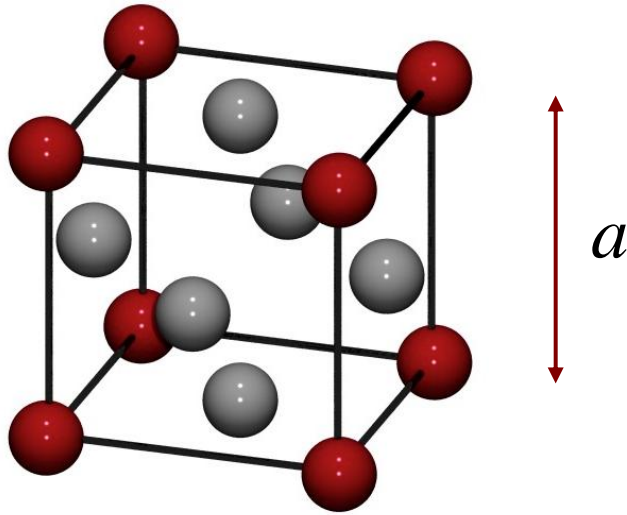
Ao contrário de uma *function*, uma subrotina calcula algo (ou várias coisas) a partir dos argumentos que lhe são passados, mas o(s) valor(es) que é (são) retornados não tem o seu nome. Sua sintaxe:

```
SUBROUTINE subroutine-name(arg1,arg2,...,argn)
  IMPLICIT NONE
  [specification part]
  [execution part]
  [subprogram part]
END SUBROUTINE subroutine-name
```

Para chamarmos um subrotina, utilizamos o comando FORTRAN **call nome(arg1,arg2,...)**.

Inicialização: Posições

Posições: em geral os átomos são posicionados inicialmente numa rede regular. Como muitos elementos da tabela periódica cristalizam-se na estrutura cúbica de face centrada, esta acaba sendo adotada como configuração inicial.



Densidade: $\rho = \frac{N}{V} = \frac{4}{a^3}$

Atomic Mac

The Atomic Mac™

Registered to:
GREGORY TETRAULT
For use only on a single machine

Hexagonal

Cubic body centered

Rhombohedral

Cubic

Cubic face centered

Monoclinic

Orthorhombic

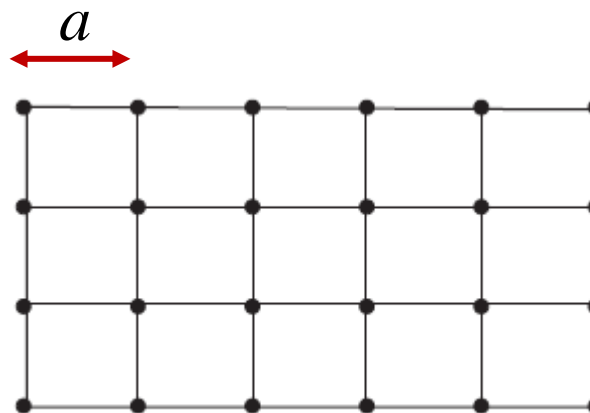
Tetragonal

H	Li	Be																	He				
Na	Mg																	B	C	N	O	F	Ne
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr						
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe						
Cs	Ba			Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn					
Fr	Ra			Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo					
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu							
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr							

Atividade de Laboratório

Esboce um programa FORTRAN que faça o seguinte:

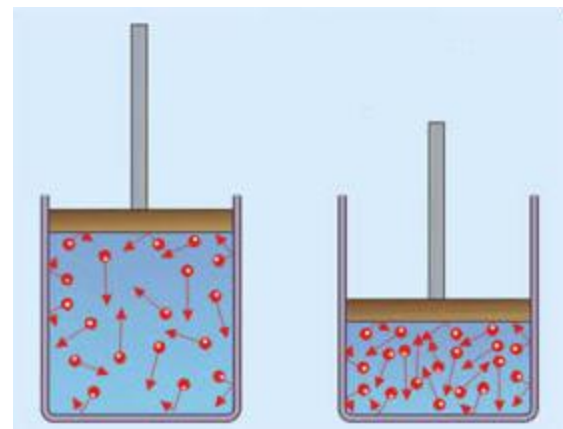
- Leia de um arquivo de entrada os inputs da simulação: número de átomos, volume, temperatura e *time step*.
- Construa uma subrotina que posicione inicialmente os átomos no volume de simulação.
- Visualize rede criada



Velocidades: Um pouco de Teoria Cinética

Foi a primeira teoria atomística para a matéria, baseada nas seguintes hipóteses simplificadoras:

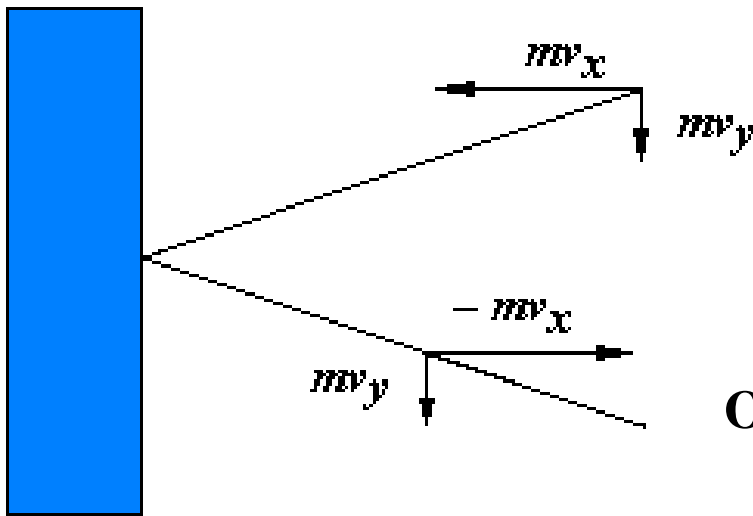
- O gás é constituído por um número muito grande de moléculas em movimento aleatório e descrito pelas leis de Newton.
- O volume próprio das moléculas é desprezível frente à distância média entre si.
- As forças intermoleculares são desprezíveis e de curto alcance, exceto nas colisões mútuas e com as paredes do recipiente, assumidas serem elásticas.



O confinamento dos átomos faz alterar suas velocidades, que ocasiona um aumento da pressão.

Teoria Cinética da Pressão

Na Teoria Cinética, a pressão sobre as paredes de um recipiente é a medida da média da taxa temporal de transferência de momento linear por unidade de área:



Onde:

$$P = \frac{1}{3} n \cdot m \cdot \langle v^2 \rangle$$

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\sum_i n_i v_i^2}{\sum_i n_i}$$

- **n** : Número de moléculas com velocidade i por unidade de volume;
- **m** : massa das moléculas;
- $\langle v^2 \rangle$: velocidade quadrática média.

No casos de fluidos não diluídos, é necessário levar em conta a interação entre os átomos.

Temperatura e Energia Cinética Média

Energia Cinética Média:

$$\frac{\langle K \rangle}{V} = \frac{1}{2} n \cdot m \cdot \langle v^2 \rangle$$

Combinando com a expressão da Pressão:

$$P = \frac{2}{3} \frac{\langle K \rangle}{V}$$

Princípio de Equipartição:

$$\langle K \rangle = \frac{3}{2} kT$$

O Resultado acima vale para um gás monoatômico, de forma que temos $\frac{1}{2} kT$ para cada grau de liberdade. Combinando as expressões acima temos:

$$PV = nkT$$

Inicialização: Velocidades

Inicialmente são atribuídos valores aleatórios (em módulo e direção), que por sua vez permite calcular a temperatura T_0 do sistema:

Energia Cinética Inicial:

$$K_0 = \sum_i \frac{mv_{0i}^2}{2} \Rightarrow k_B T_0 = \frac{2K_0}{3N}$$

Se a temperatura desejada para o sistema é T , as velocidades devem ser rescalonadas de forma a resultarem na temperatura desejada:

Ajuste das velocidades:

$$v'_i = v_{i0} \sqrt{\frac{T}{T_0}}$$

$$k_B = 8.6173 \times 10^{-5} \text{ eV} / K$$

O Teorema de Equipartição da Energia Cinética estabelece a conexão entre K e T !!!

Modelos de Interação entre os Átomos

A escolha do potencial de interação depende da natureza das ligações químicas entre os átomos constituintes. Alguns exemplos populares:

- **Stillinger-Weber e Tersof:** Silício e Carbono
- **Cleri Rosato:** Metais
- **“Force Fields”:** moléculas
- ...

$$U(r) \rightarrow \vec{F} = -\vec{\nabla} \cdot U$$

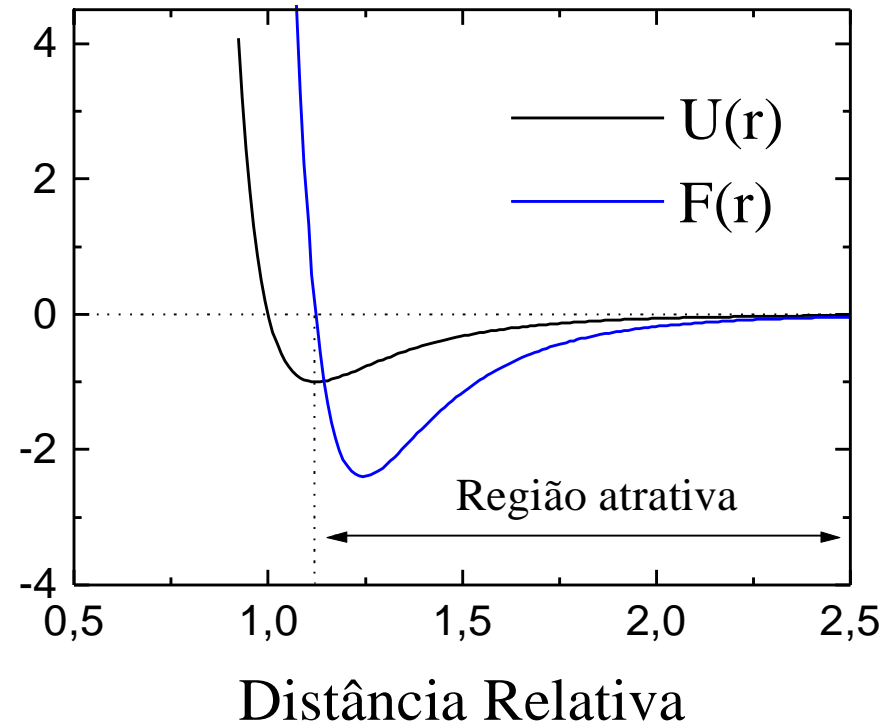
Os potenciais acima citados são complexos e envolvem interações entre muitos corpos. A utilização de potenciais de pares pode ser bastante útil quando não se pretende uma descrição quantitativa acurada do sistema.

Potencial de Lennard-Jones

O Potencial de Lennard-Jones dá a energia potencial de dois átomos separados de uma distância r . Apropriado particularmente ao estudo de gases nobres. Depende de dois parâmetros, que podem ser obtidos de dados experimentais: ε e σ .

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Este potencial pode ser adaptado para o estudo de metais, pois estes – como os gases nobres – não formam ligações direcionais.



Unidades Reduzidas

Os valores de ε e σ , que definem o potencial, juntamente com a massa atômica m definem um sistema natural de unidades. Neste sistema as grandezas físicas seriam adimensionais. Neste sistema, o potencial de LJ fica da seguinte forma:

I – Grandezas Fundamentais	
Energia: ε	Massa: m (atômica)
Distância: σ	Tempo: $\sigma\sqrt{m/\varepsilon}$
II – Grandezas Derivadas	
Força: $F^* = \frac{F\sigma}{\varepsilon}$	Velocidade: $v^* = v\sqrt{m/\varepsilon}$
Densidade: $\rho^* = \frac{N\sigma^3}{V}$	Temperatura: $T^* = \frac{k_B T}{\varepsilon}$

$$U^*(r^*) = \frac{U}{\varepsilon} = 4 \left[\left(\frac{1}{r^*} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r^*} \right)^6 \right],$$
$$r^* = \frac{r}{\sigma}$$

Unidades Reduzidas: Argônio

<i>Grandeza</i>	<i>Unidade</i>	<i>Valor Numérico</i> <i>(Ar)</i>
Comprimento	σ	3,40 Å
Energia	ε	10,26 meV
Massa	m	$6,63 \times 10^{-23}$ g
Temperatura	$T_0 = \frac{\varepsilon}{k_B}$	119,04 K
Velocidade	$v_0 = \sqrt{\frac{\varepsilon}{m}}$	157,4 m/s
Tempo	$t_0 = \sigma \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}$	$2,16 \times 10^{-12}$ s

Atividade de Laboratório

No programa de dinâmica molecular que foi iniciado na aula anterior, faça:

- Um procedimento que atribua as velocidades iniciais dos átomos, com direções e sentidos aleatórios.
- Calcule a temperatura instantânea correspondente à configuração inicial e rescale as velocidades de modo a se obter a temperatura de entrada.
- Esboce uma subrotina que visa calcular a energia potencial do sistema. Empregue as unidades reduzidas.

Simulações de Dinâmica Molecular: Ingredientes

- (i) **Modelo de interação entre os átomos:** Potencial de Lennard-Jones
- (ii) **Vínculos Externos:** (N , V , E) constantes (microcanônico)
- (iii) **Inicialização:** Rede CFC para as posições
- (iv) **Evolução:** Algoritmo de Verlet
- (v) **Análise:** Grandezas físicas computadas após a termalização.

O código desenvolvido simula uma liga binária A_xB_{1-x} , de modo que para simularmos um sistema simples temos que escolher $x = 1.0$

Propriedades Termodinâmicas

$$U = \sum_i \sum_{j \neq i} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

$$K = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^N v_i^2, \quad T = \frac{1}{3Nk_B} \langle K \rangle$$

$$P = \rho k_B T - \frac{1}{3V k_B T} \left\langle \sum_i \sum_j r_{ij} \frac{dU}{dr_{ij}} \right\rangle$$

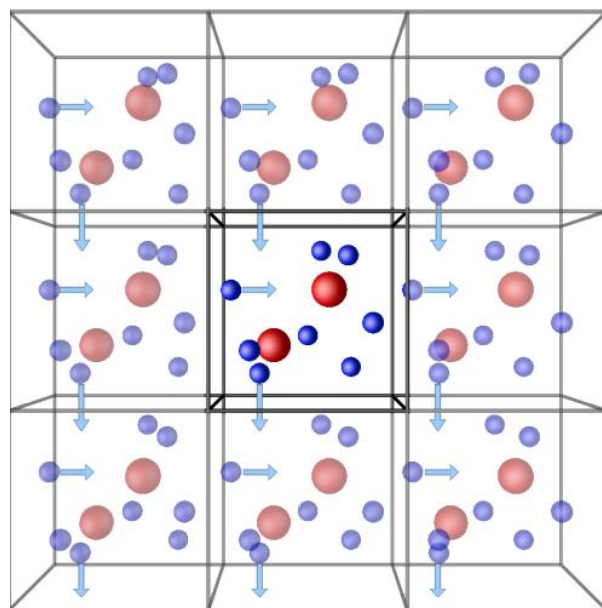
Estas grandezas servem para monitorar a duração da fase de termalização: suas médias tem que convergir para um valor compatível com os vínculos impostos.

- A relação que conecta T com K é o princípio da equipartição da energia;
- A pressão tem dois termos: um do gás ideal e o termo do virial.

Condições de Contorno Periódicas

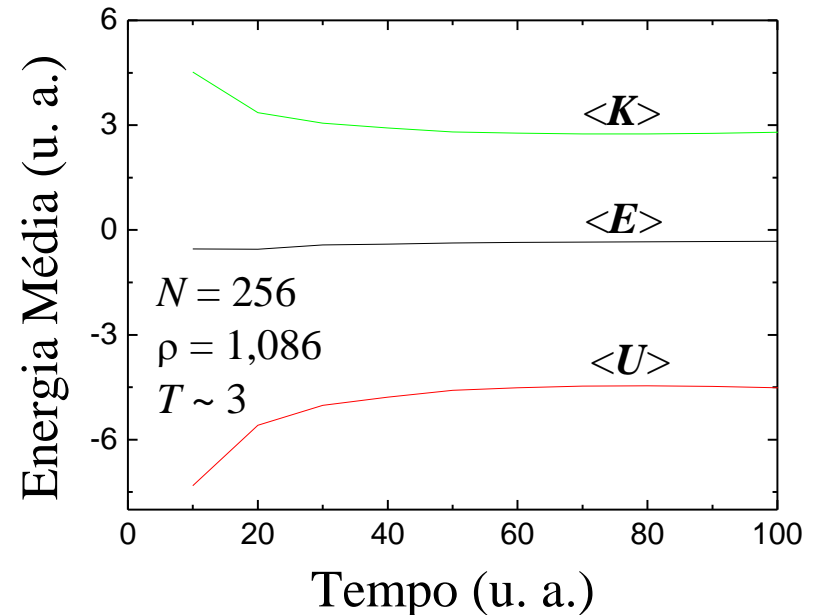
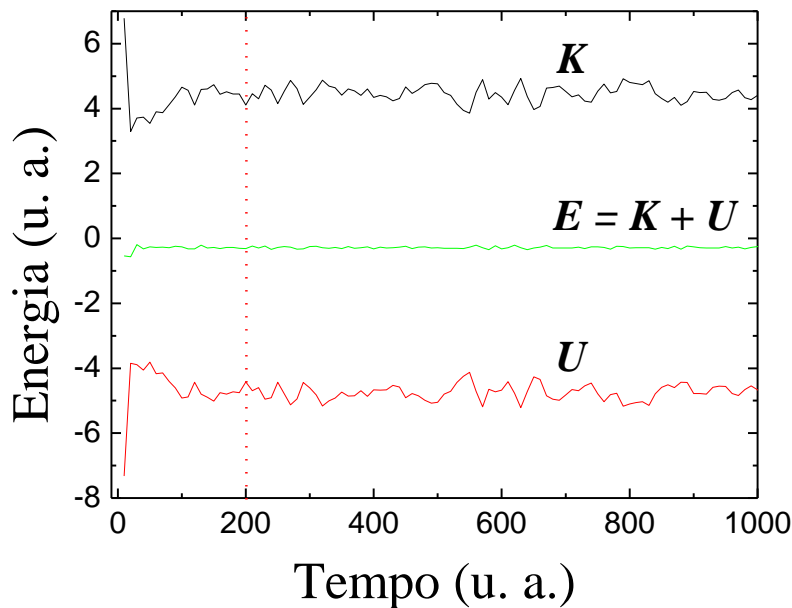
As Condições de Contorno Periódicas fazem com que todos os átomos do sistema fiquem confinados num volume fixo, evitando a introdução de superfícies no sistema. Qualquer átomo que saia dos limites do sistema é rebatido para dentro dele novamente: saindo por uma face, o átomo entra novamente pela face oposta.

Podemos introduzir uma superfície “desabilitando” as CCP em alguma direção cartesiana.



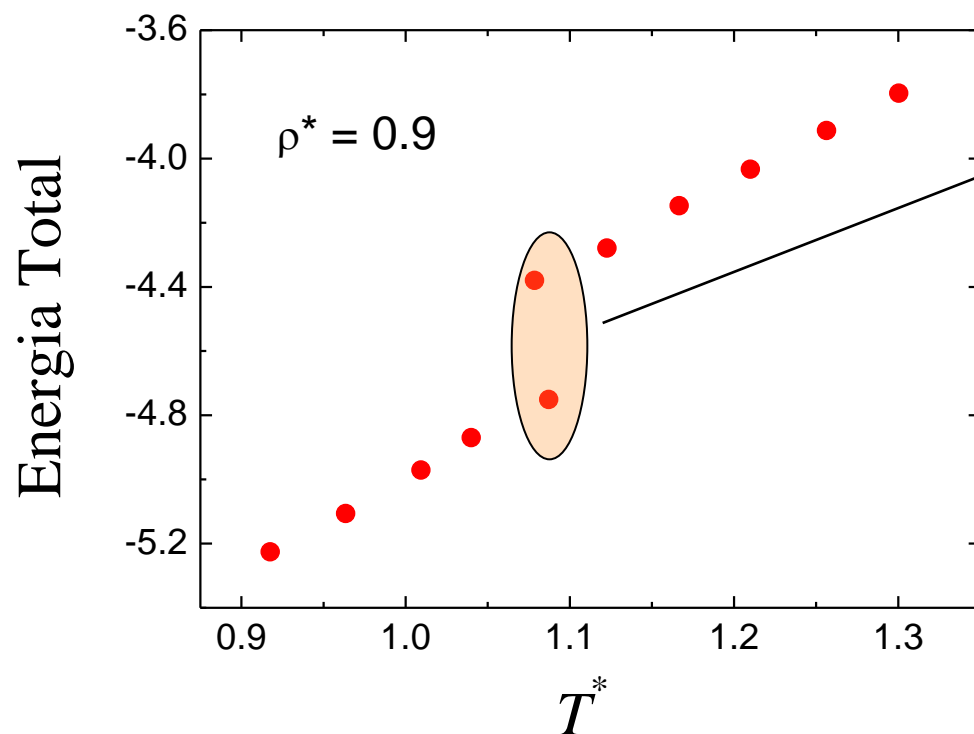
Propriedades Termodinâmicas I

Para simular um sistema simples usando DINMOL.x, basta impor $x = 1.0$ (um elemento apenas na liga). Note abaixo a evolução dos valores instantâneos das energias (esquerda) e de suas respectivas médias.



Propriedades Termodinâmicas II

Comportamento da energia total com respeito à temperatura, densidade $\rho = 0.9$!



Transição de fase??

Transições de fase de primeira ordem, como a sólido-líquido, são caracterizadas por mudanças descontínuas nas propriedades termodinâmicas:

$$C_v = \frac{dE}{dT}$$

Laboratório: O programa DM3d.f90

Este programa realiza dinâmica molecular de um sistema de N átomos, onde os mesmos são posicionados inicialmente num volume cúbico (posições regulares). As seguintes atividades devem ser feitas:

- Dar uma vista geral no programa, de modo a entender parcialmente o que ele faz e tirar dúvidas;
- Fixar a densidade do arquivo de entrada em 0.7 e fazer uma sequência de simulações com a temperatura variando de 0.4 a 1.5 de 0.1 em 0.1 (construir um gráfico $E \times T$ (T deve ser a temperatura final do programa));
- Repetir o procedimento do item anterior para as densidades 0.8 e 0.9. Analisar a presença de descontinuidades.

Laboratório: O programa DM3d.f90

Na figura abaixo temos o diagrama de fase de uma substância de Lennard-Jones. As linhas indicam co-existência de fases.

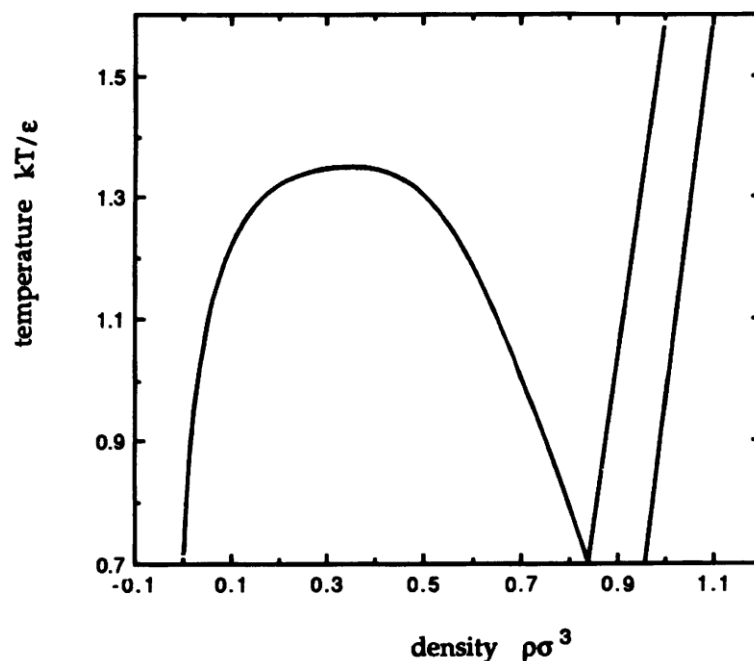
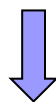


FIGURE 5.7 Temperature–density phase diagram for the pure Lennard-Jones (12,6) substance. The vapor–liquid saturation curve was computed using the Nicolas et al. [3] equation of state. The melting lines were taken from Hansen and McDonald [10].

Como quantificar uma mudança de Fase?

A assinatura de uma mudança de fase é mais evidente quando mantemos o vínculo de temperatura constante. Porém, em nosso programa é a energia mecânica E , e não a temperatura, que se mantém constante.

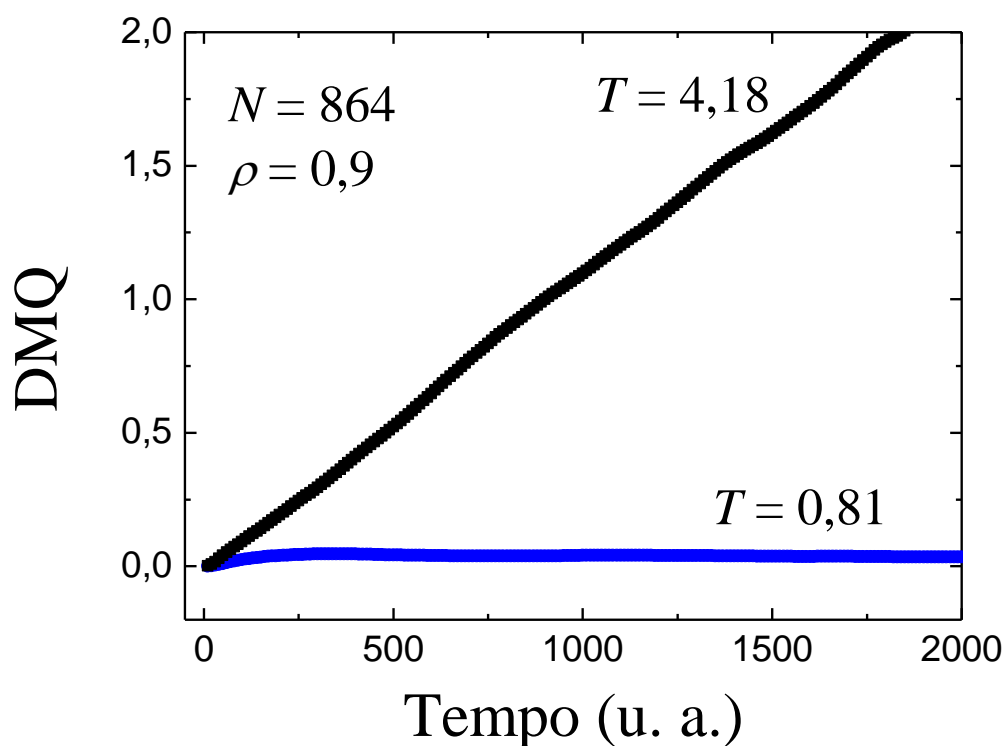


A simples inspeção visual da curva E versus T não é suficientemente segura!!!

Temos que pensar em grandezas que sejam sensíveis às mudanças de fase do sistema!

Desvio Quadrático Médio

Das grandezas possíveis se serem extraídas de uma simulação de DM, a função distribuição de pares $g(r)$ e o desvio quadrático médio fornecem informações sobre o arranjo médio dos átomos.



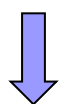
$$DQM = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N [r_i(j) - r_i(0)]^2$$

A inclinação da reta do DQM é proporcional ao coeficiente de auto-difusão do material.

Parâmetro de Ordem de Verlet

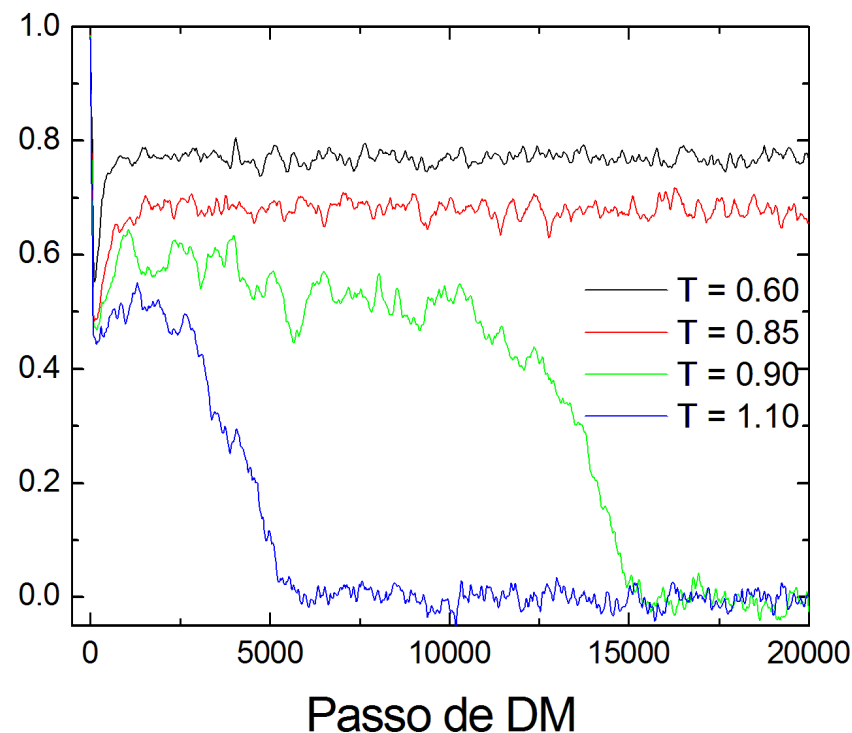
Em seu artigo de 1967, Verlet introduziu o parâmetro de ordem translacional λ para caracterizar a fusão de um sistema de N átomos que interagem via potencial de Lennard-Jones, à medida que a temperatura varia (Loup Verlet, Phys. Rev. **159**, 98 (1967)). Sua definição é está abaixo, junto com seus valores para várias temperaturas ($\rho = 0.9$):

$$\lambda_k = \frac{1}{N} \sum_i \cos(k x_i)$$

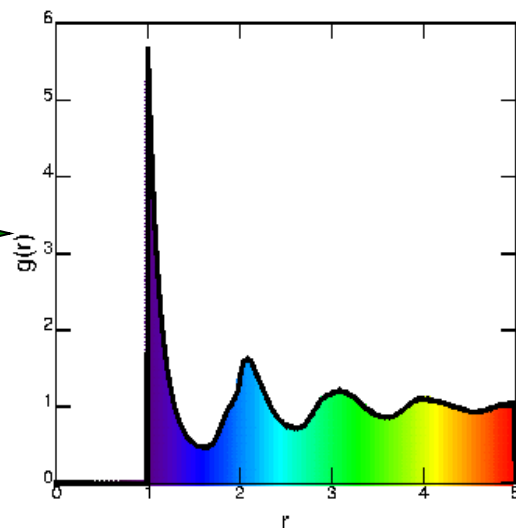
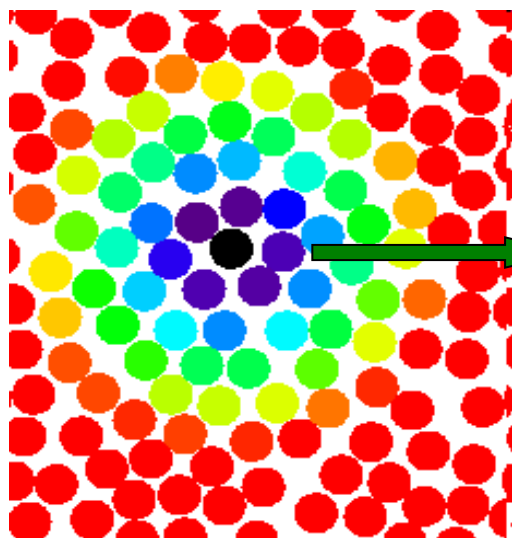


$$\lambda = \frac{1}{3} (\lambda_x + \lambda_y + \lambda_z)$$

λ

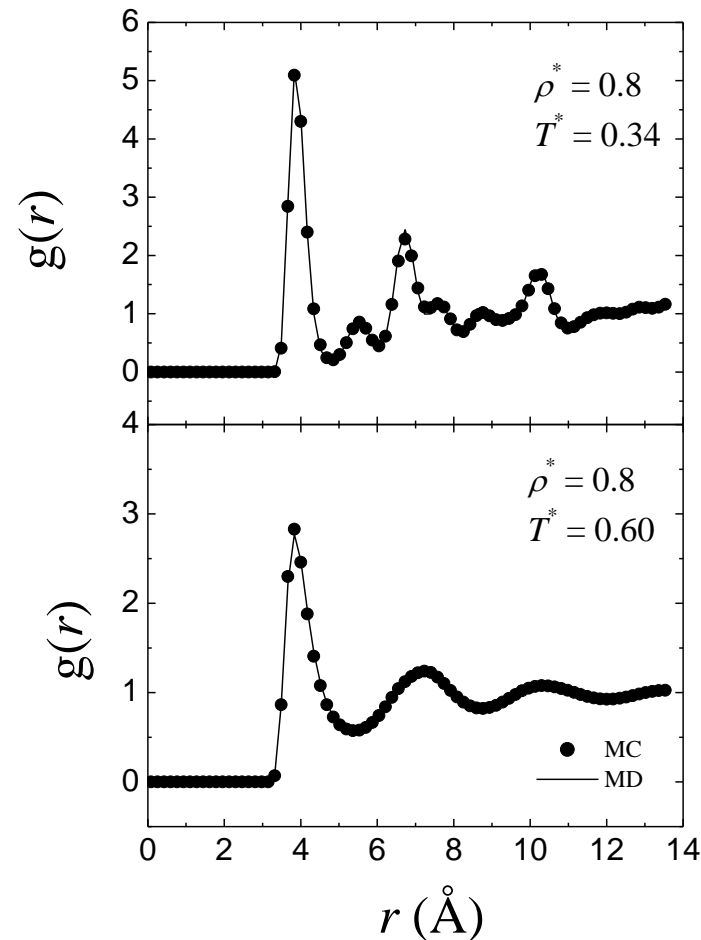


Sólido ou Líquido?



**Função Distribuição
de Pares:**

$$g(r) = \frac{\eta(r, \delta r)}{\eta_{ideal}(r, \delta r)}$$





III – Simulando uma Liga Binária

Metodologia I

O potencial de Lennard Jones adaptado para sistemas binários tem a seguinte forma:

$$U_{mn}(r) = \varepsilon_{mn} \left[\left(\frac{\sigma_{mn}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{mn}}{r} \right)^6 \right] \quad \left\{ \begin{array}{l} \bullet m \text{ e } n: \text{Espécies atômicas do par} \\ \bullet \varepsilon_{mn} \text{ e } \sigma_{mn}: \text{parâmetros do potencial} \\ \bullet r: \text{distância entre os átomos do par} \end{array} \right.$$

Numa liga binária temos duas espécies distintas presentes, A e B. Assumido a primeira, A, como referência, os parâmetros ε_{BB} , σ_{BB} , ε_{AB} e σ_{AB} são expressos em termos de ε_{AA} , σ_{AA} (unidades reduzidas):

$$\frac{\varepsilon_{BB}}{\varepsilon_{AA}} = \beta, \quad \frac{\sigma_{BB}}{\sigma_{AA}} = \delta, \quad \frac{\varepsilon_{AB}}{\varepsilon_{AA}} = \alpha, \quad \frac{\sigma_{AB}}{\sigma_{AA}} = \delta$$

Metodologia II

- Todas as simulações aqui apresentadas foram realizadas considerando $N/V = \rho = 0.9$ e $x_A = x_B = 0.5$;
- Dado o largo espaço amostral de parâmetros, fixamos a razão entre as massas igual à unidade e consideramos $\beta = \gamma = \delta = 1.0$;
- A temperatura foi variada dentro do intervalo $1.0 \leq T^* \leq 2.0$ (em unidades reduzidas);
- Foram estudadas as mudanças estruturais induzidas pela variação da temperatura e do parâmetro α .

Efeito dos Parâmetros em Aglomerados

No estudo ao lado temos o diagrama de fases de aglomerados em termos dos parâmetros da liga!

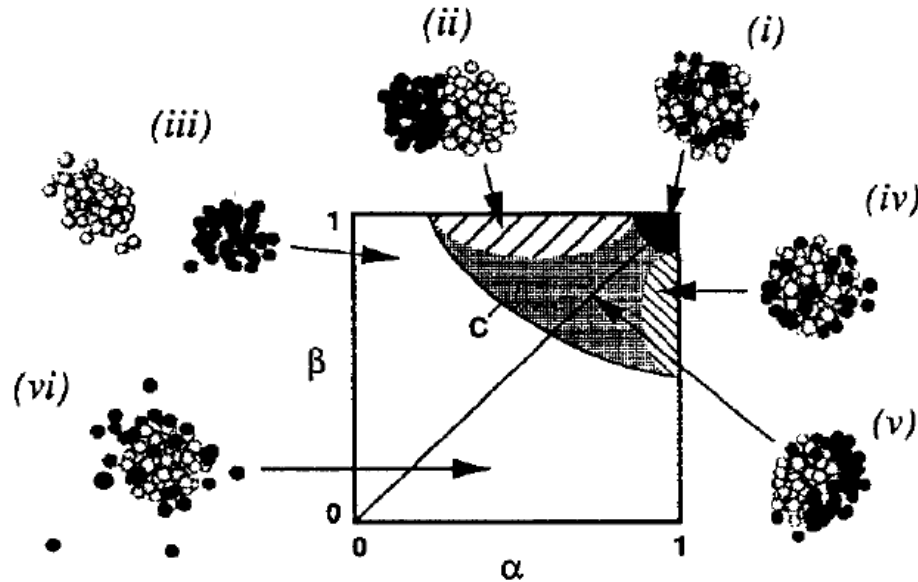
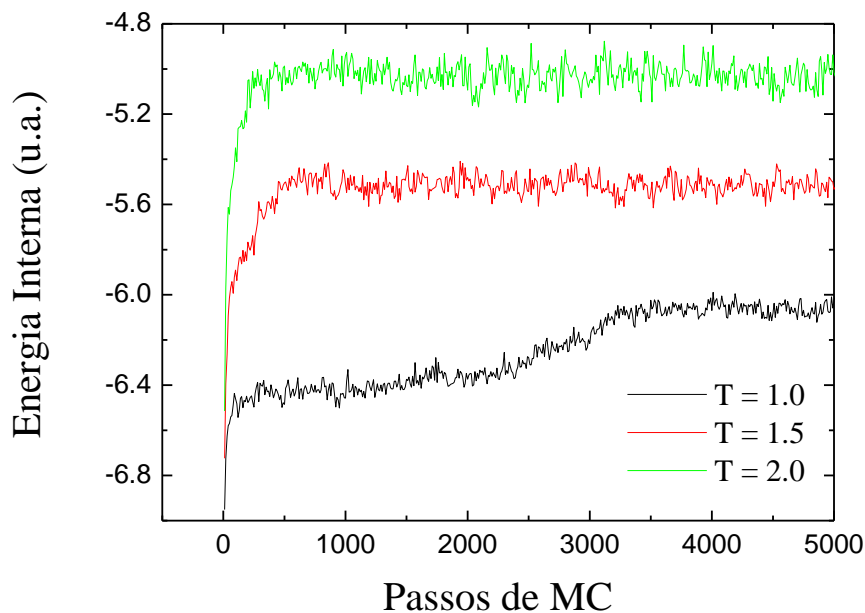


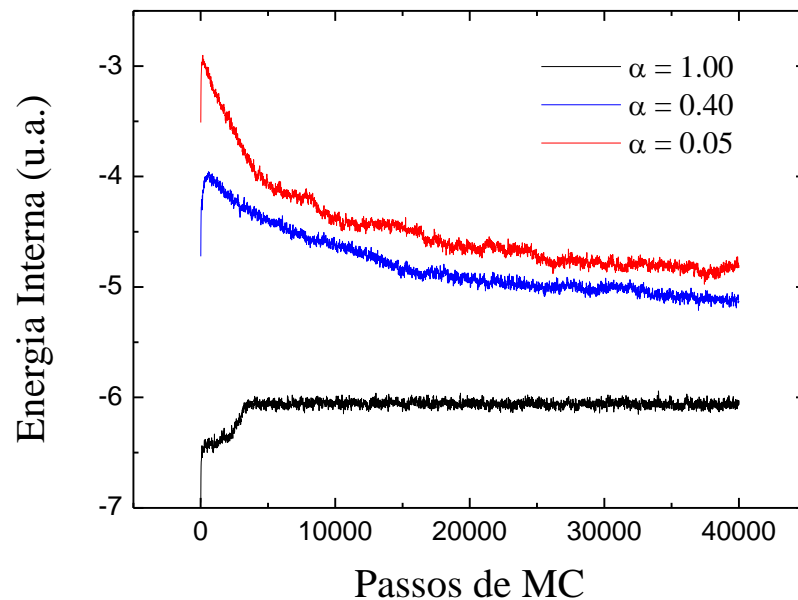
FIG. 1. Schematic phase diagram showing cluster morphologies as a function of α and β for fixed temperature T in the liquid regime and $x_A = 1/2$. The various regions in the diagram are discussed in the text. The sample cluster configurations shown in the figure were obtained at $T^* = k_B T / \epsilon_{AA} = 0.31$ with $\epsilon_{AA} = 121$ K and $N_A = N_B = 55$.

Journal of Chem. Phys 101, 2432 (1994)

Termalização do Sistema



(a) Energia em função do número de passos de Monte Carlo para três temperaturas, fixando $\alpha = 1.0$. Note que quanto mais baixa a temperatura maior é o tempo de termalização do sistema.

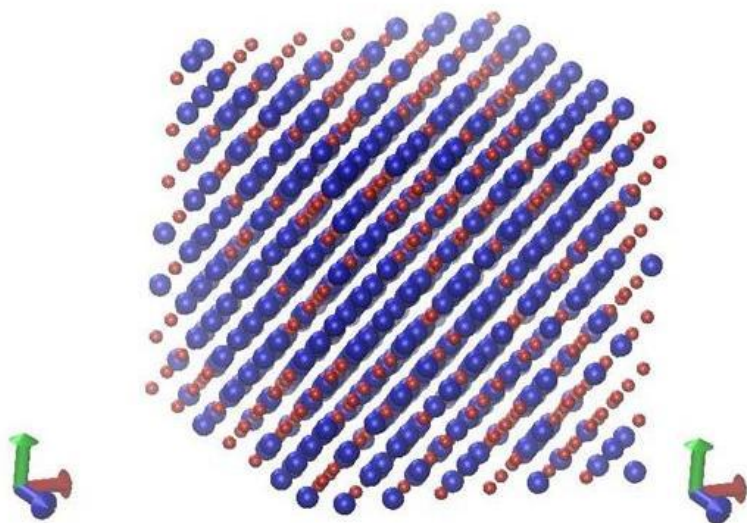


(b) Fixando a temperatura em 1.0 vemos que a medida que o valor de α diminui, maior é o tempo de termalização.

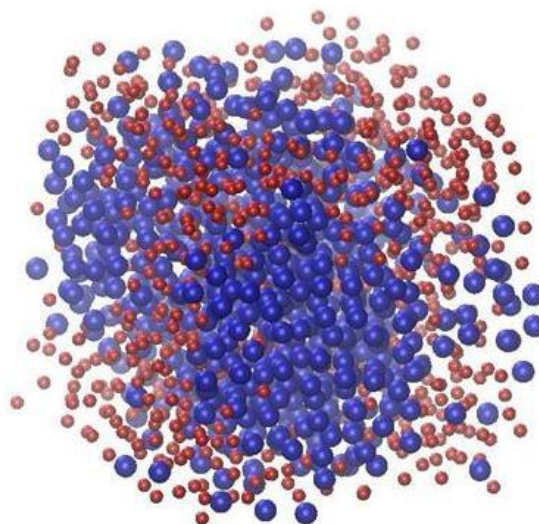
Evolução do Sistema

Sistema com 1372 átomos com densidade $\rho^* = 0.9$, temperatura $T^* = 1.5$, $\alpha = 0.4$ e razão entre as massas de 1.0 (vide *slide* anterior)

Estrutura Inicial

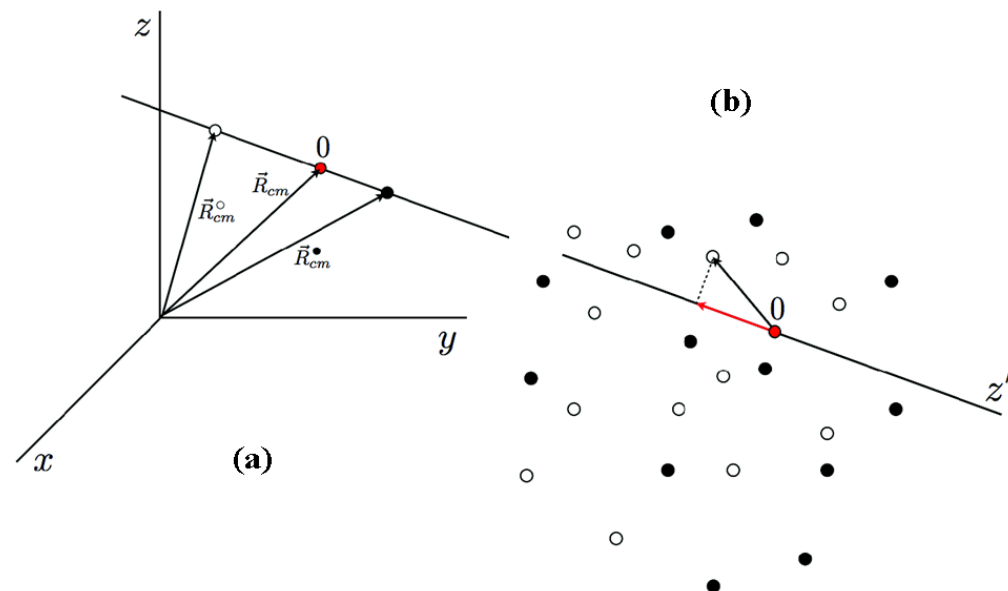


Estrutura Final

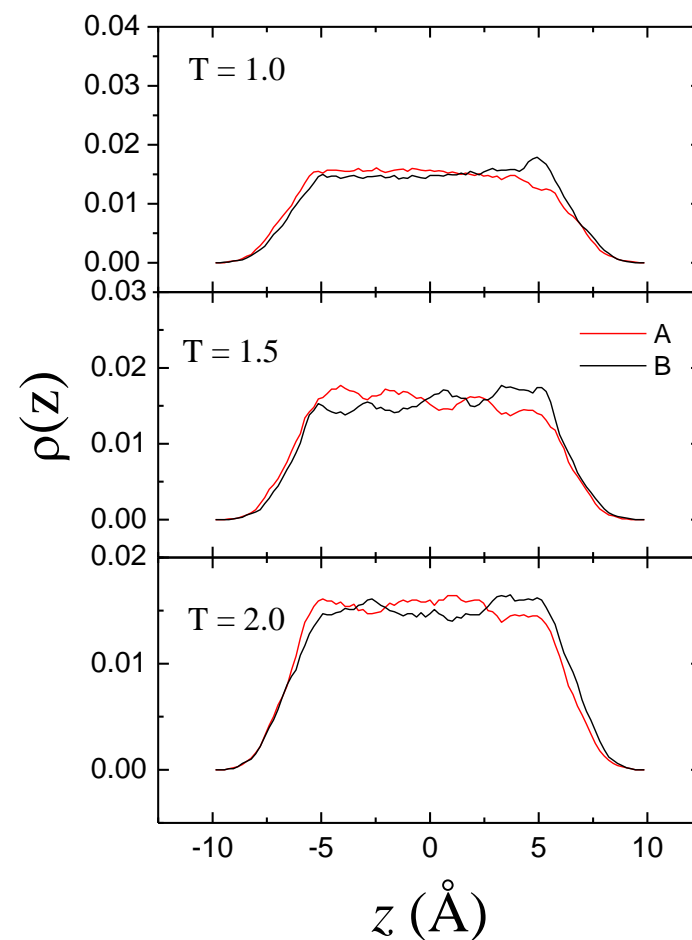


Segregação das espécies atômicas!

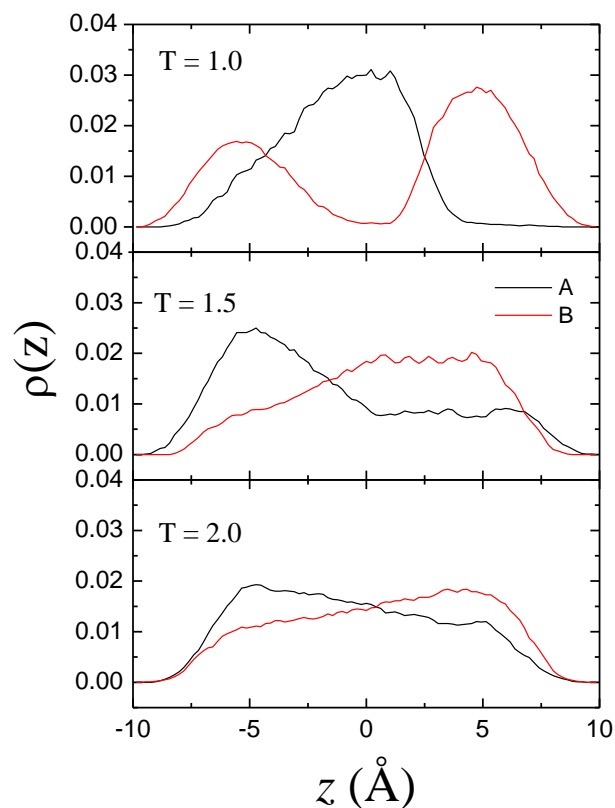
Perfil Linear de Densidade



O perfil linear de densidade é o perfil da densidade em relação à reta que une os seus centros de massa. Ao lado temos seus valores para $\alpha = 1.0$ (sistema simples)



Perfil Linear de Densidade



PLD para $\alpha = 0.4$ (esquerda) e $\alpha = 0.05$ (direita). Note o efeito da segregação.

