

ESTUDO COMPUTACIONAL DE NANOESTRUTURAS E NANOPARTÍCULAS

SANTOS, Wesley Vilela dos ¹ (wesley.vilela.dos.santos@hotmail.com), FACCIN, Giovani Manzeppi ² (giovani.faccin@ufgd.edu.br)

¹ Bolsista PIBIC do curso de licenciatura em Física da UFGD - Dourados, ² Coordenador do Laboratório de Ciência dos Materiais Computacional da UFGD - Dourados

Introdução

Se é possível a descrição matemática de fenômenos, então pode-se simular, por meio da computação, o comportamento virtual do sistema de interesse para uma vasta gama de condições. Com isso, a simulação computacional vem tomando uma importância cada vez maior como ferramenta para obtenção do conhecimento científico. Na perspectiva da nanociência, a qual possui grande complexidade experimental na construção de nanoestruturas, faz-se necessário o uso métodos alternativos que possam facilitar a compreensão dos fenômenos naturais, sendo assim, a modelagem computacional se configura como uma técnica importante para desenvolvimento dessa ciência.

Objetivo

Abordar técnicas, métodos e modelos computacionais de simulação de materiais magnéticos e suas propriedades estudadas durante a iniciação científica em física computacional da matéria condensada.

Métodos

Modelo Hamiltoniano de Spin

Nesse modelo acrescenta-se mais graus de liberdade ao modelo clássico de Heisenberg: os momentos magnéticos podem se alinhar em qualquer direção. A evolução temporal do sistema é dada integrando-se através de um algoritmo derivado do método de Monte Carlo, a equação a seguir [1]:

$$\frac{\partial S_i}{\partial t} = \frac{-\gamma e}{(1+\lambda^2)} [S_i \times H_{eff}^i + \lambda S_i \times (S_i \times H_{eff}^i)]. \quad (1)$$

Sendo que a hamiltoniana do sistema é:

$$\mathcal{H} = \sum_{i<j} J_{ij} S_i \cdot S_j - \sum_i k_u S_{i,z}^2. \quad (2)$$

Método de Dinâmica molecular

Dinâmica Molecular (*Molecular Dynamics* – MD) é um método amplamente utilizado para a obtenção de informações dinâmicas sobre a estrutura de moléculas e fases condensadas (gases, sólidos e líquidos) em escala atômica [2]. A técnica consiste na integração das equações de movimento newtonianas de um sistema de muitas partículas interagentes sujeitas à diferentes possibilidades de *ensembles* estatísticos e potenciais de interação construídos de maneira a reproduzir propriedades físicas reais de materiais sujeitas a determinadas restrições. Assim, para um sistema de N partículas que interagem entre si de acordo com um potencial interatômico, a evolução temporal será dada pela integração das equações de Newton [3]:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = \sum_{j=1}^N F_{ij} \quad (3)$$

onde r_i e m_i representam o vetor posição e a massa de cada partícula i , t representa o tempo e F_{ij} é a força da partícula j agindo sobre a partícula i , sendo $|F_{ij}| = |F_{ji}|$. A força F_{ij} é obtida pelo gradiente da energia potencial interatômica $U(r_{ij})$, sendo r_{ij} a distância entre os átomos i e j :

Resultados

Modelo Hamiltoniano de Spin

A figura 1 apresenta a visualização gráfica do sólido macroscópico de níquel com uma célula unitária de 20 nm produzida pelo software OVITO, o qual serviu de modelo para o estudo da interação entre o sólido e campos magnéticos externos.

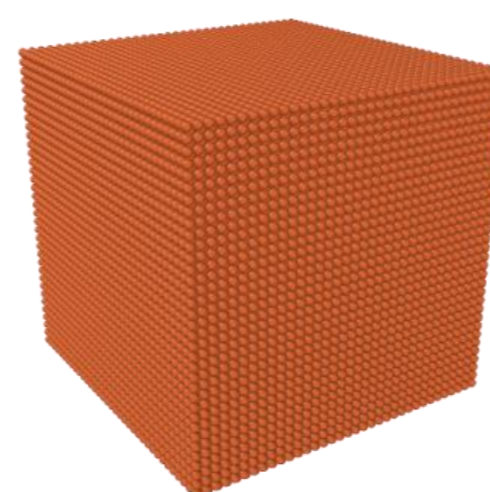


Figura 1: Representação gráfica da supercélula unitária do sólido macroscópico de níquel simulado.

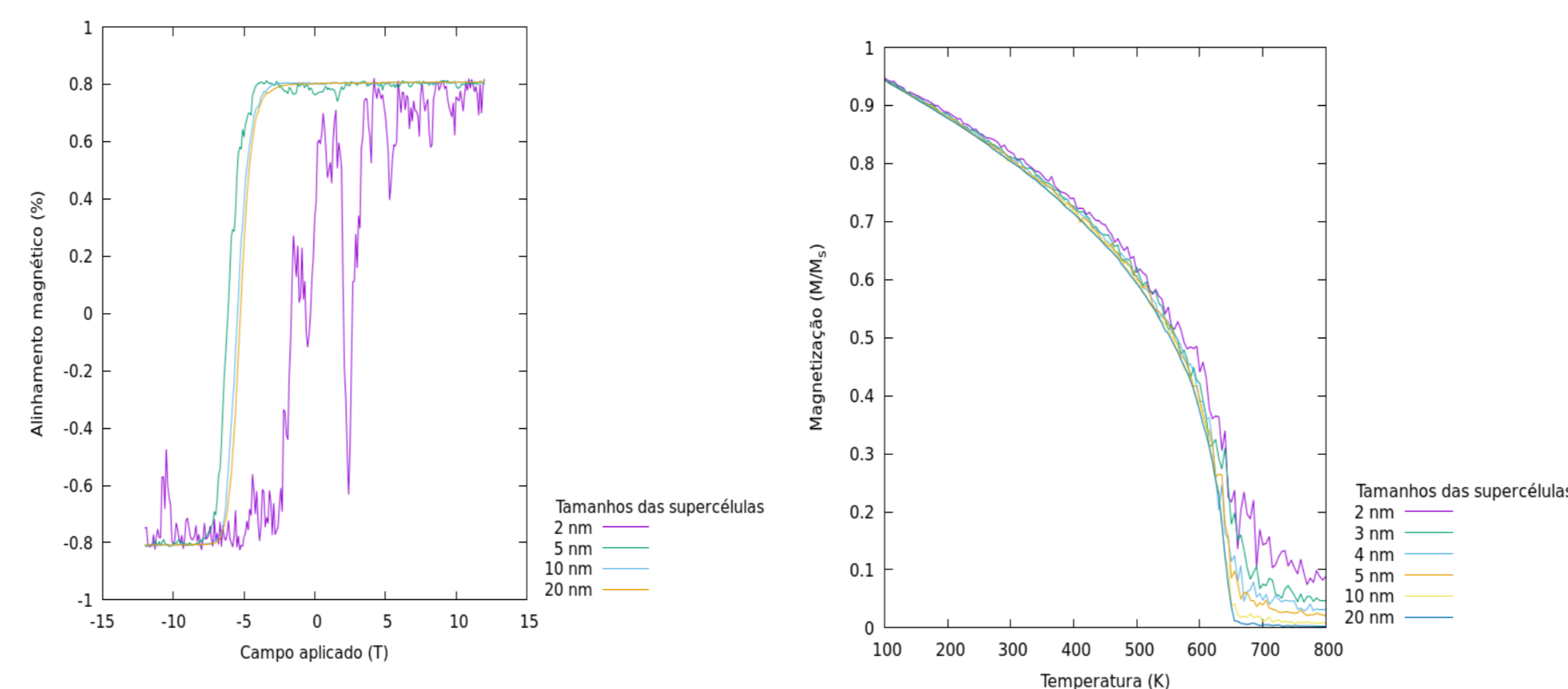


Figura 2: Gráficos de alinhamento magnético e magnetização que nos permitem estimar a temperatura de Curie e características do processo de histerese para um sólido macroscópico de níquel.

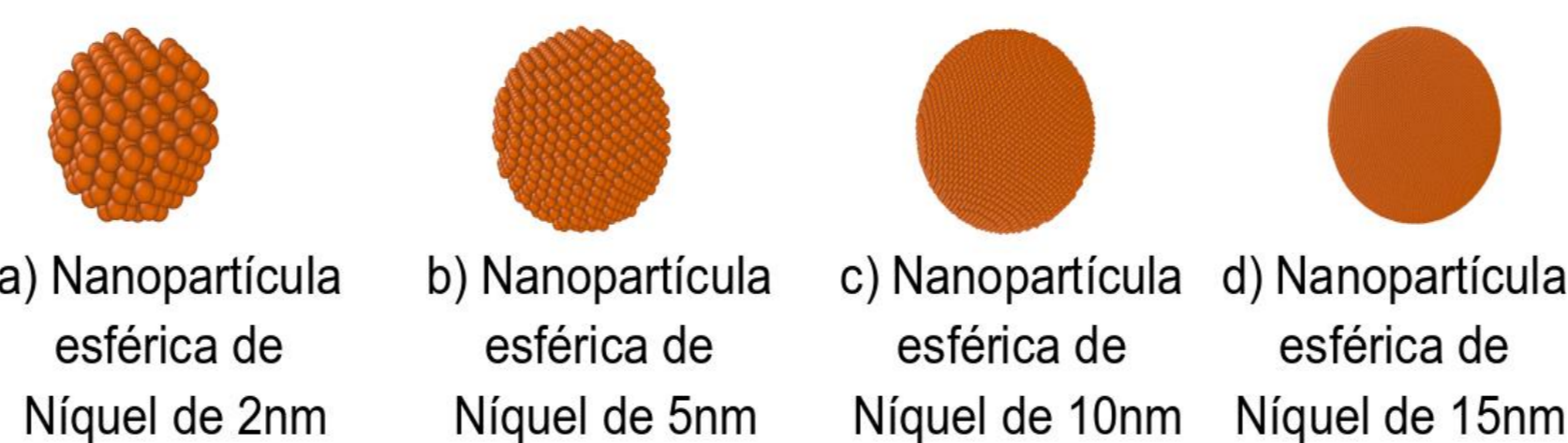


Figura 3: Representações gráficas das nanopartículas esféricas de níquel de diversos tamanhos.

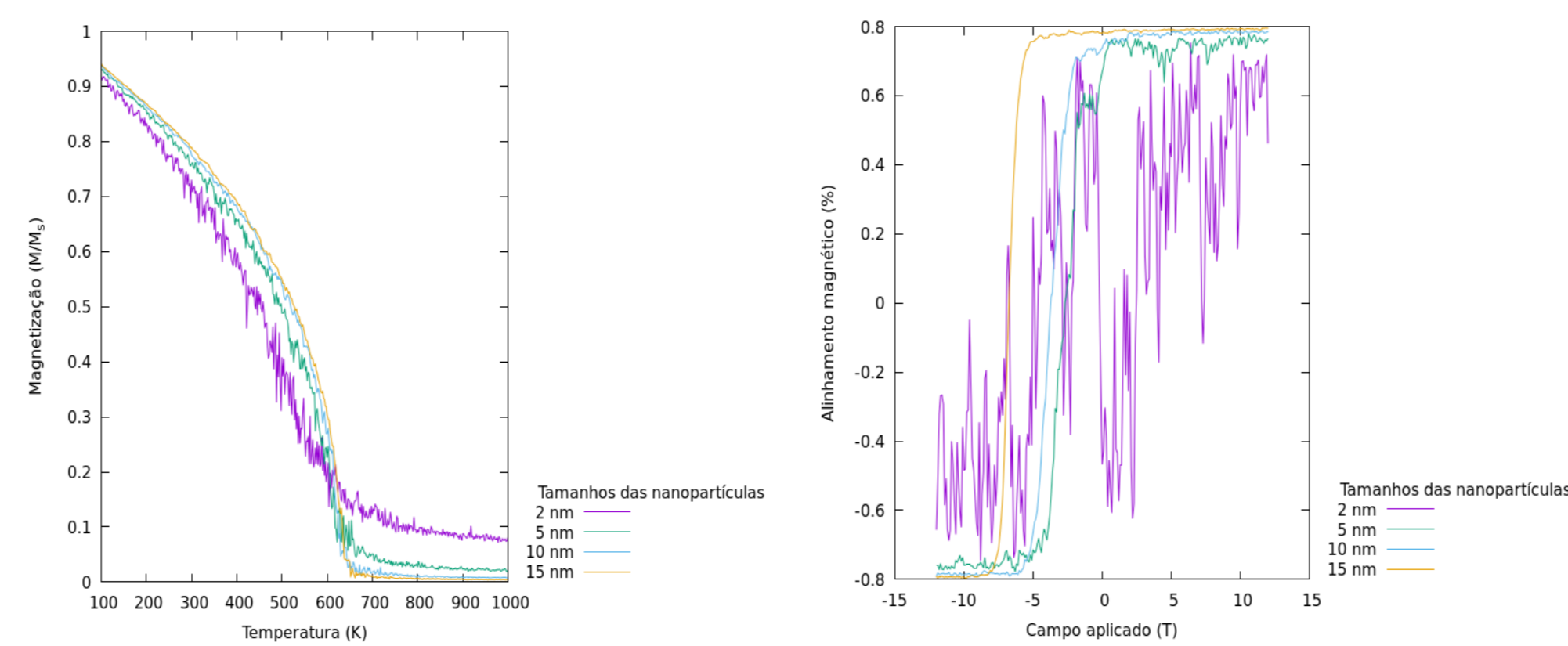


Figura 4: Alinhamento magnético e magnetização em função dos tamanhos das nanopartículas esféricas de níquel e temperatura.

Método de Dinâmica Molecular

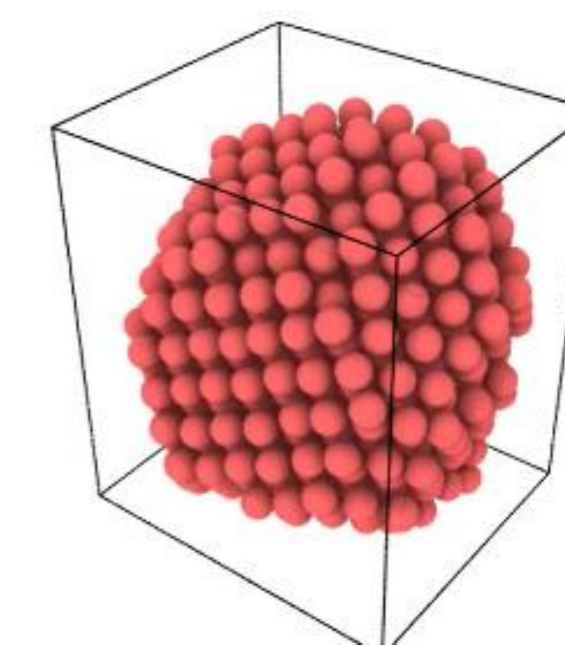


Figura 5: Representação gráfica de um modelo para nanopartícula de prata.

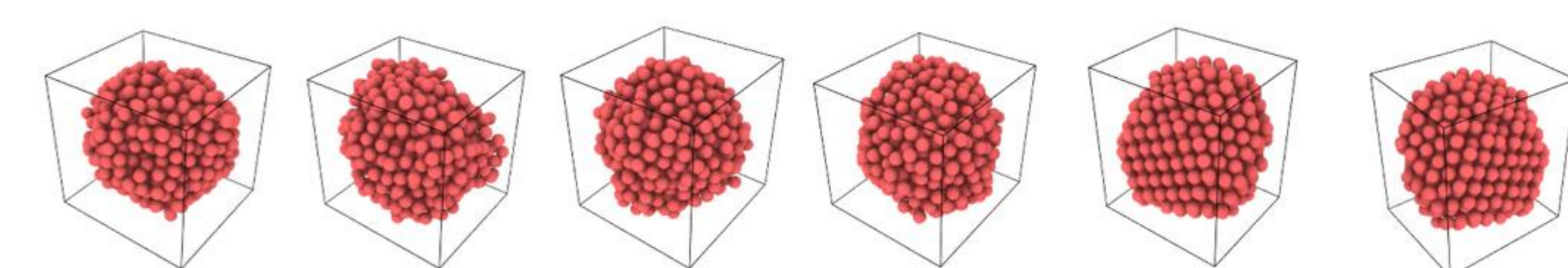


Figura 6: Momentos do vídeo de resfriamento da nanopartícula de prata, com temperatura variando de 1200 K a 300 K.

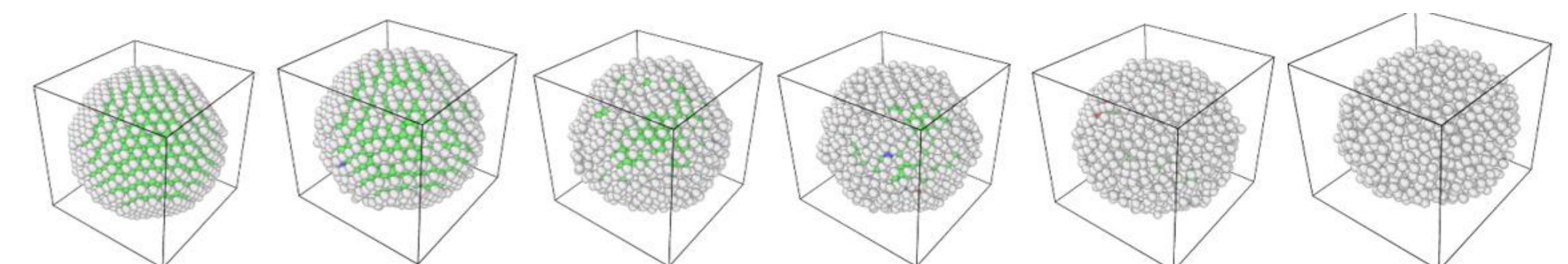


Figura 7: Momentos do vídeo de aquecimento da nanopartícula de prata de 3.5 nm, com temperatura variando de 300 K a 1200 K.

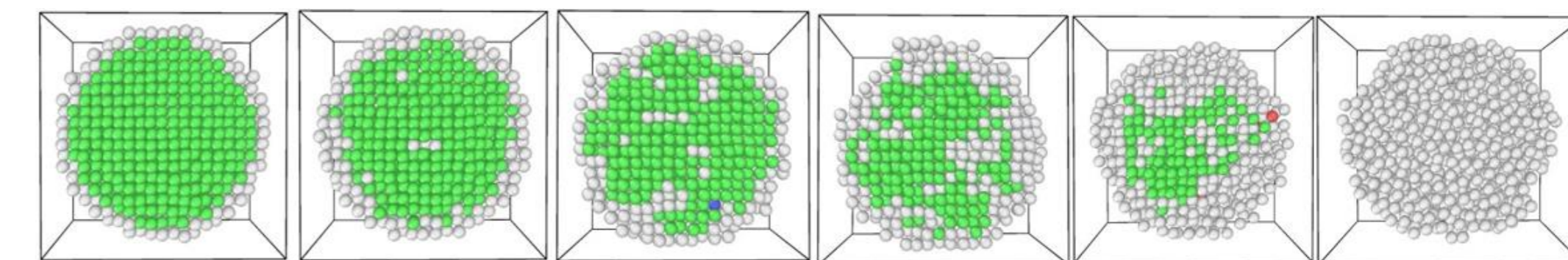


Figura 8: Momentos do vídeo de aquecimento da nanopartícula de prata de 4 nm, com temperatura variando de 300 K a 1200 K.

Conclusões

- O programa Vampire, baseado no modelo Hamiltoniano de spin, permitiu a obtenção de propriedades físicas de modelos construídos visando simular materiais compostos de Níquel.
- O domínio da técnica de Dinâmica Molecular - DM por meio do programa LAMMPS possibilitou uma exploração mais completa de características do material.
- Com a DM é possível visualizar a dinâmica atômica, realizar interações, obter pontos críticos, visualizar arranjos e obter transições características.

Referências

- [1] EVANS, R. F. L. *et al.* **Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials.** V. 26, n. 10. Journal of Physics: Condensed Matter. IOP Publishing, p. 103202, 2014.
- [2] RAPAPORT, D. C. **The Art of Molecular Dynamics Simulation.** Cambridge University Press, 2nd ed, 2004.
- [3] FRENKEL, D.; BEREND, S. **Understanding molecular simulation: from algorithms to applications.** Vol. 1. Academic press, 2001.

Realização:

UFGD
Universidade Federal
da Grande Dourados

UEMS
Universidade Estadual
de Mato Grosso do Sul

Parceiros:

CAPES

CNPq
Conselho Nacional de Desenvolvimento
Científico e Tecnológico

