



## FUSÃO BIDIMENSIONAL: UMA ANÁLISE COMPUTACIONAL DE ESTRUTURAS CRISTALINAS

ALEXANDRE VARGAS ILHA<sup>1</sup>; JOSÉ RAFAEL BORDIN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Pelotas – [alexandre.ilha@ufpel.edu.br](mailto:alexandre.ilha@ufpel.edu.br)

<sup>2</sup>Universidade Federal de Pelotas – [jrbordin@ufpel.edu.br](mailto:jrbordin@ufpel.edu.br)

### 1. INTRODUÇÃO

O estudo de transição de fase é introduzido na física ainda no ciclo de formação básica. Estamos acostumados a classificar as transições e nomear as mudanças de fase. Por um aspecto acadêmico, as transições de fase são caracterizadas em dois tipos: transições descontínuas e contínuas.

Transições descontínuas, ou de primeira ordem, é caracterizada por apresentar uma reestruturação considerável na mudança de fase. Fisicamente é comum esperarmos que parâmetros físicos apresentem mudanças bruscas como por exemplo a entropia e o volume.

Outro tipo de transição é denominado de contínua, ou de segunda ordem. Nessas transições não encontramos descontinuidades em características físicas como o volume e a entropia.

As transições de fase, comumente descritas a partir do comportamento físico de suas variáveis, podem ser classificadas enquanto transições contínuas ou descontínuas. Isto é fisicamente aceitável, porém, para casos tridimensionais (3D) a situação é mais simples. Esperamos que corpos 3D apresentem uma única transição descontínua, mas isso não é verdade quando analisamos corpos bidimensionais (2D).

As transições bidimensionais sempre foram um grande desafio conceitual, uma vez que não era permitido haver uma transição descontínua para corpos desse tipo. A proposta para análise surge na teoria KTHNY, propondo uma fase intermediária proporcionando duas transições de fase contínua a partir de uma fase Hexática intermediária.

A análise estrutural de corpos 2D, bem como o comportamento da transição será analisada neste trabalho. Para compreender o comportamento desse derretimento para uma série de agregações moleculares diferentes, analisaremos um sistema conhecido CARDOSO et al. (2021) a partir de uma série de isóbaras diferentes. Com isso, espera-se determinar uma fase Hexática intermediária conforme a teoria KTHNY bem como a caracterização termodinâmica das fases trabalhadas, focando na problematização do derretimento 2D.

### 2. METODOLOGIA

Para analisarmos a proposta de estudo de mudanças de fase 2D, utilizaremos simulação de dinâmica molecular para simular a interação competitiva entre coloides. Utilizaremos coloides de caroço amolecido, no qual existirá uma região interna dura e uma região externa amolecida, de modo que a interação competitiva pode ser modelada por potenciais que envolvam essas interações MARQUES et al. (2020).

A técnica de dinâmica molecular consiste em solucionar numericamente as equações clássicas de movimento, de modo que conseguimos a partir de um potencial de interação descrever o comportamento de propriedades como a



posição e a velocidade da partícula. O modelo efetivo utilizado é caracterizado por um caroço interno duro e enxertos poliméricos que formam uma casa mole externa. Definido o modelo a ser utilizado e o potencial de interação, para a realização da simulação molecular falta a definição de um pacote. Aqui será utilizado o pacote LAMMPS (THOMPSON et al., 2022), um software de código aberto responsável por mediar a interação via dinâmica molecular.

É a partir do LAMMPS que escolhemos um conjunto de quatro pressões respectivas as fases triangular, *stripes* e *kagome* NOGUEIRA; BORDIN (2022) e CARDOSO et al. (2021), analisadas como isóbaras a fim de avaliarmos o comportamento da estrutura para uma série de temperaturas. Realizamos simulações de larga escala temporal de uma solução de 5000 nanopartículas utilizando, ao longo de isóbaras de aquecimento, um incremento de temperatura  $\Delta T = 0.02$  para as pressões 1.0, 4.0 e 9.0. Uma representação instantânea de cada fase pode ser vista na figura 2.

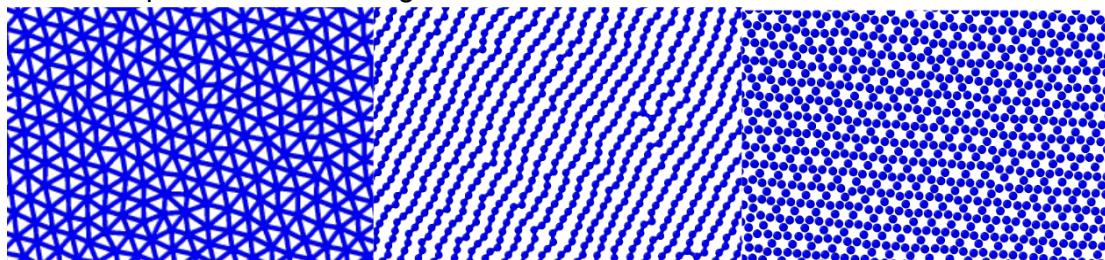


Figura 1. Representação visual das fases cristalinas para as pressões relativas às fases triangular, *stripes* e *kagome*, respectivamente.

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para descrevermos e analisarmos as estruturas 2D formadas e o derretimento da fase sólida –com uma fase Hexática intermediária ou não–, precisamos introduzir novos parâmetros das propriedades dinâmicas e estruturais (tanto translacionais como orientacionais). Informações detalhadas sobre a estrutura estão sendo calculadas e apresentadas futuramente, porém, ainda podemos caracterizar várias propriedades do sistema.

Uma das propriedades importantes para o sistema é a Entalpia. Como podemos ver nas figuras 2, 3 e 4 a entalpia do sistema apresenta um comportamento diferente se compararmos as três pressões analisadas.

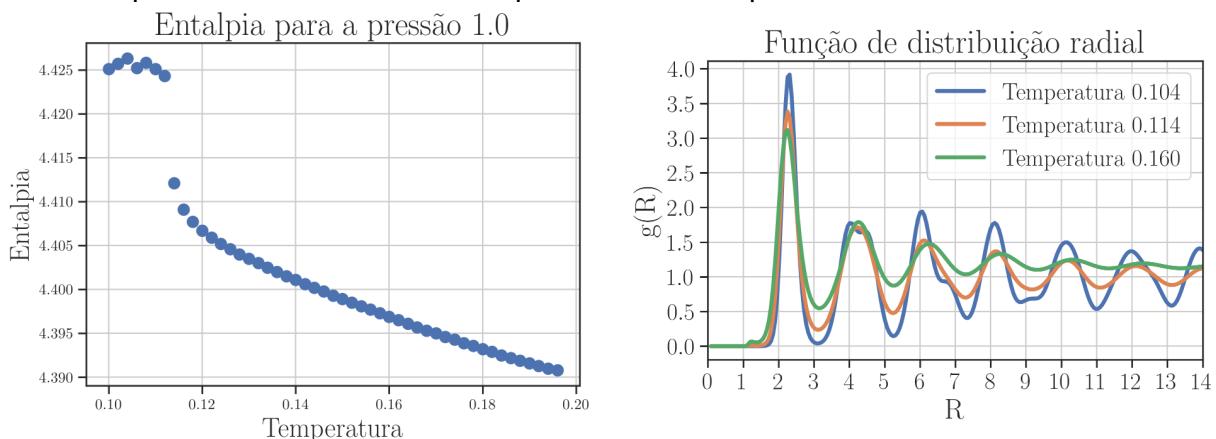


Figura 2. Comportamento da entalpia e da função de distribuição radial para a pressão 1.0.

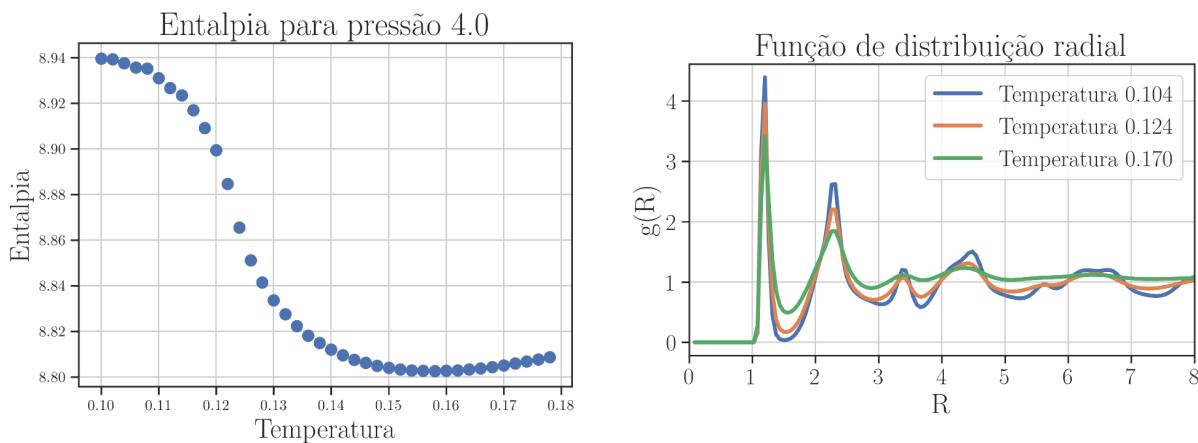


Figura 3. Comportamento da entalpia e da função de distribuição radial para a pressão 4.0.

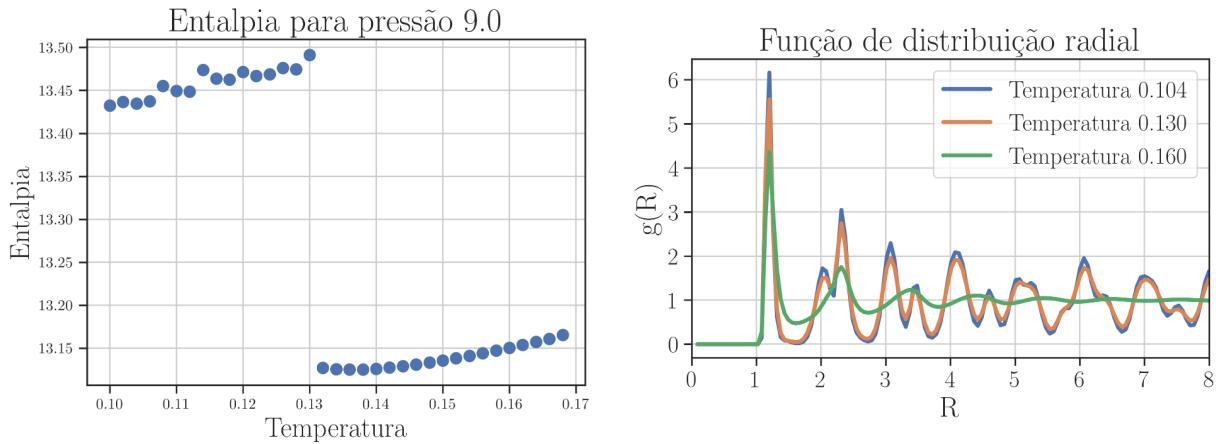


Figura 4. Comportamento da entalpia e da função de distribuição radial para a pressão 9.0.

Como comparativo, podemos analisar a função de distribuição radial para cada pressão. Para a primeira pressão, temos temperaturas respectivas a cada comportamento do gráfico da entalpia na figura 2. Vemos pelo gráfico que a entalpia apresenta uma descontinuidade em torno de uma temperatura 0.114, aparentemente mudando de um estado em que a entalpia pouco varia para, após a descontinuidade, apresentar um comportamento de decaimento. A função de distribuição radial nos ajuda na análise desse comportamento. Vemos que para uma temperatura anterior da região de descontinuidade, o sistema aparenta estar em uma região sólida ordenada. Para a temperatura de 0.114 o sistema aparenta perder algumas propriedades, porém, com um comportamento de picos e vales semelhantes a temperatura anterior. A última temperatura analisada, já no limite do comportamento apresentado de entalpia, apresenta um comportamento de tipicamente um fluido com algum tipo de ordenamento.

A segunda pressão, representada pela figura 3, diferente do caso anterior, não apresenta nenhuma descontinuidade. O comportamento da entalpia indica que o sistema passa por algum tipo de mudança --transição de fase-- de maneira gradual, não de forma abrupta como no caso anterior. Ao analisarmos a função de distribuição radial para as temperaturas, vemos que fisicamente a distribuição aparenta ser descrita de uma forma gradual.



Por fim, a última pressão expressa pela figura 4, nos mostra outro comportamento descontínuo. O sistema até a temperatura de 0.13 apresenta uma entalpia que oscilava em torno de um valor de 13.45, porém, para a temperatura seguinte de 13.02 o sistema já apresenta uma entalpia menor que 13.15. Como podemos ver no gráfico, temos uma descontinuidade expressiva. Para analisarmos um pouco melhor a transição, podemos analisar a função de distribuição radial para três temperaturas de interesse. Vemos que com o aumento de temperatura até a temperatura de transição, o sistema apresenta uma diminuição no seu ordenamento, porém após essa temperatura ele apresenta um comportamento exclusivamente semelhante a fase fluida --mesmo que com resquícios de uma simetria sólida anterior.

#### 4. CONCLUSÕES

O trabalho caracteriza uma etapa intermediária da análise de sistemas desse tipo. As caracterizações até o momento feitas indicam dois comportamentos igualmente interessantes, tanto o comportamento de transição contínuo quanto descontínuo são importantes. A previsão conceitual indica como deveria ocorrer um reordenamento, porém, o sistema trabalhado apresenta conclusões físicas iniciais que nos colocam em dúvida quanto ao comportamento do sistema.

Análises específicas quanto a estruturação são necessárias para a identificação plena do tipo de fase em cada momento do sistema, além da identificação da fase hexática prevista segundo a teoria KTHNY. A entalpia e a função de distribuição radial são importantes para, mesmo que de forma introdutória, tomarmos conhecimento acerca do comportamento termodinâmico e estrutural do sistema.

Os próximos passos são pensados de forma que sejam calculados os parâmetros faltantes do sistema, enquanto o resto dos dados são finalizados. Depois de finalizada a simulação e os cálculos físicos, será analisada o comportamento do resfriamento do sistema. Faremos uma análise inversa para analisarmos o comportamento desse sistema transicionando de uma fase fluida para uma fase sólida, a fim de analisarmos futuramente como ocorre devidamente essa mudança.

#### 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CARDOSO, D. S.; HERNANDES V. S.; NOGUEIRA T. P. O.; BORDIN J. R. Structural behavior of a two length scale core-softened fluid in two dimensions. **Physica A**, v. 566, n. 1, p. 125628, 2021.
- MARQUES. M. S.; NOGUEIRA. T. P. O.; DILLENBURG R. F.; BARBOSA M. C.; BORDIN J. R. Waterlike anomalies in hard core–soft shell nanoparticles using an effective potential approach: Pinned vs adsorbed polymers. **Journal of Applied Physics**, v. 126, n. 1, p. 054701, 2020.
- THOMPSON. A. P.; et al. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, **Computer Physics Communications**, v. 271, n. 1, p. 10817, 2022.
- THOMPSON. A. P.; et al. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, **Computer Physics Communications**, v. 271, n. 1, p. 10817, 2022.