

## UMA ANÁLISE DA DINÂMICA DURANTE O DERRETIMENTO E CONGELAMENTO EM CRISTAIS BIDIMENSIONAIS

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

<sup>1</sup>*Universidade Federal de Pelotas – ilhaav@gmail.com*

<sup>2</sup>*Universidade Federal de Pelotas – jrbphys@gmail.com*

### 1. INTRODUÇÃO

Transição de fase é um dos fenômenos mais comuns da termodinâmica no nosso dia a dia. Contudo, a complexidade do derretimento em duas dimensões não está plenamente compreendida. Existe uma demanda emergente na compreensão da formação de novas fases com propriedades específicas, como por exemplo a determinação de fases supercondutoras (NEUPERT, et. al., 2021), propriedades elétricas (WANG, et. al., 2022) ou até mesmo o efeito de fases e transições para sistemas que envolvam doenças no corpo humano (WANG, et. al., 2021). Ao passo que fases e transições são importantes, o efeito de histerese historicamente também despertou o interesse científico (XU, et. al., 2023).

Neste trabalho estamos interessados no estudo do efeito da histerese no sistema. Para isso começaremos desenvolvendo o modelo utilizado e o potencial efetivo, bem como todos os detalhes simulacionais de tempo de simulação e controles de temperatura e pressão.

### 2. METODOLOGIA

Utilizaremos a Dinâmica Molecular, que consiste na resolução das Equações Clássicas do Movimento para um sistema com uma quantidade grande de partículas. Modelamos um colóide de caroço amolecido (CA), uma aproximação efetiva para nanopartículas metálicas com enxertos poliméricos, proposto originalmente por DE OLIVEIRA et al. (2010), como a soma de um potencial com de Lennard-Jones de curto alcance (caroço duro) e um termo Gaussiano repulsivo centrado em  $r_0$ , com profundidade  $u_0$  e largura  $c_0$  (coroa mole),

$$U_{cs}(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + u_0 \exp \left[ - \frac{1}{c_0^2} \left( \frac{r-r_0}{\sigma} \right)^2 \right]. \quad (1)$$

Onde  $u_0 = 5\epsilon$ ,  $c_0^2 = 1.0$  e  $r_0/\sigma = 0.7$ , resulta no potencial do tipo rampa, figura 1. N=5000 discos foram modelados no ensemble NPT (isobárico-isotérmico). Todas as unidades e os valores usados são dados em termos de unidades reduzidas (ALLEN; TILDESLEY, 2017). As simulações foram realizadas com o pacote de simulação LAMMPS (THOMPSON et al., 2022). A temperatura e a pressão foram mantidas fixas com o acoplamento do sistema em um reservatório externo através do termostato e barostato de Nosé-Hoover.

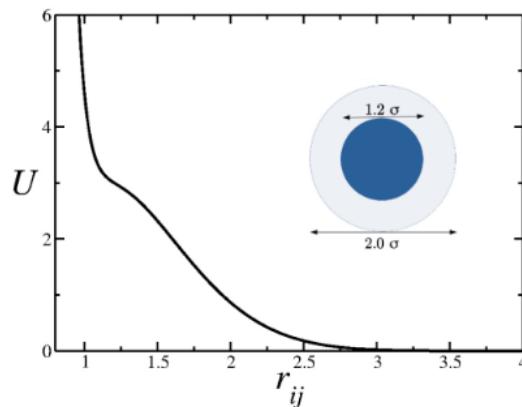


Figura 1: Gráfico do potencial de duas escalas do sistema com uma rampa repulsiva seguida de uma região atrativa. Na parte interna da figura, uma representação do modelo efetivo de caroço amolecido.

Para analisarmos os efeitos da dinâmica do sistema durante a histerese estrutural, definimos três isóbaras uma referente a cada estrutura bidimensional. As pressões  $p=1.0$ ,  $p=4.0$  e  $p=9.0$  são referentes às fases Triangular, Stripes e Kagome (CARDOSO et al., 2021). Uma representação visual das três fases pode ser visto na figura 2 (ILHA;BORDIN, 2022).

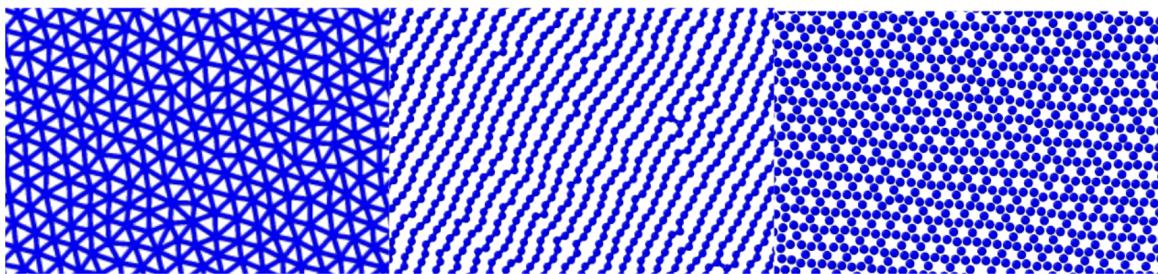


Figura 2: Simetria das fases Triangular, Stripes e Kagome, respectivamente.  
Figura retirada de ILHA;BORDIN (2022).

De forma inicial, as partículas foram dispostas dentro da caixa de simulação de maneira aleatória. Cada isóbara representa variações de temperatura que vão desde  $T=0.10$  até  $T=0.20$ , com uma variação  $dT=0.02$ . O sistema vai da temperatura mais baixa até a mais alta durante o derretimento até a máxima temperatura para o sistema retornar posteriormente para uma baixa temperatura durante o congelamento.

Estamos especialmente interessados na dinâmica do sistema durante o congelamento e o derretimento. O coeficiente de difusão é definido pela relação de Einstein como sendo

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \Delta r(t)^2 \rangle}{4 t^2}, \quad (1)$$

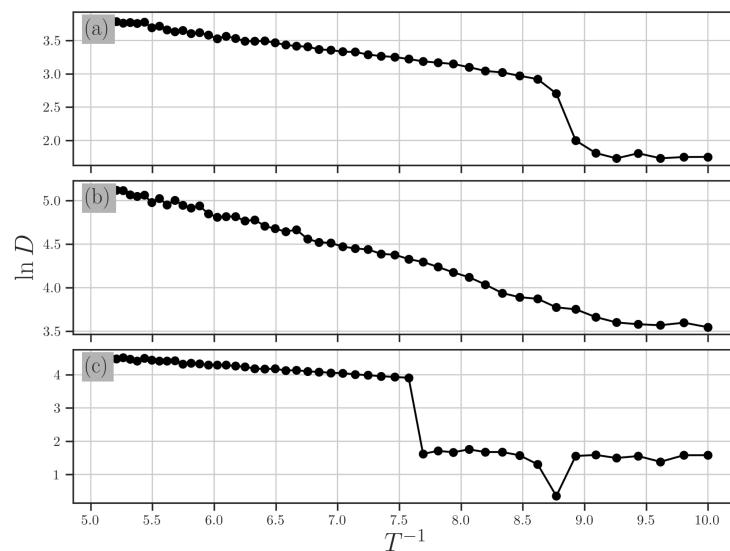
onde  $\langle \Delta r(t)^2 \rangle$  é o deslocamento quadrático médio, dado pela relação:

$$\langle \Delta r(t)^2 \rangle = \langle [r(t) - r(t_0)]^2 \rangle \quad (2)$$

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a fase triangular na figura 3 (a), observamos que a difusão permanece com uma inclinação até a região da transição em torno da temperatura  $T=0.13$  e  $T=0.132$ , onde apresenta uma descontinuidade indicando uma mudança grande na movimentação do sistema. Como analisamos o inverso da temperatura, observamos o sistema indo de um fluido sem estruturação e com uma difusão grande para um sólido estruturado. No começo do gráfico, vemos que o fluido tem uma inclinação na difusão grande que diminui até a temperatura de transição e depois decai consideravelmente para temperaturas onde o sistema está em uma região sólida.

Na figura 3 (b) observamos que a difusão do sistema para a fase Stripes decai de maneira quase que constante apesar do sistema transitar de uma fase sólida para uma fase fluida. Resultados recentes apontam para que a fase Stripes não apresenta nem mudanças estruturais bruscas durante o derretimento, o que se repete agora durante o estudo da difusão.



*Figura 3: Difusão do sistema derretendo pelo inverso da temperatura para a fase (a) Triangular, (b) Stripes e (c) Kagome.*

Por fim, na figura 3 (c) para a fase Kagome vemos um comportamento diferente. A difusão para a fase fluida é expressiva, uma vez que uma fase fluida apresenta naturalmente uma difusão elevada. Porém, quando nos aproximamos da temperatura de derretimento, observamos uma mudança brusca na difusão. Essa alteração acentuada indica que o sistema apresenta uma transição de forma abrupta de um sólido estruturado para um fluido com grande difusão.

No congelamento da fase LDT, figura 4 (a), vemos que o comportamento geral é semelhante, já a fase Stripes, figura 4 (b), observa-se o mesmo comportamento que no derretimento. O que se destaca é a fase Kagome na figura 4 (c). O sistema congelando apresenta valores de difusão intermediário para temperaturas em torno da transição, o que não foi observado no derretimento. Não é novidade que a fase Kagome apresenta uma série de comportamentos peculiares, e como vimos, para a difusão não foi diferente. O sistema estar congelando ou derretendo resulta em diferenças visíveis para a fase Kagome.

#### 4. CONCLUSÕES

No recorte de resultados apresentados neste trabalho, conseguimos observar os efeitos práticos que a histerese causa ao sistema. Para determinadas simetrias conseguimos identificar que existe um comportamento diferente se compararmos o sistema derretendo ou congelando. Resultados sobre efeitos de histerese não são novidades, porém, focamos na compreensão da dinâmica do sistema e não dos efeitos orientacionais. Os resultados recentes auxiliam na compreensão do processo jogando uma luz sobre o estudo de transições desse tipo, porém, torna-se necessário a análise de diversas outras ferramentas quantitativas referentes à dinâmica do sistema para varrermos profundamente o processo.

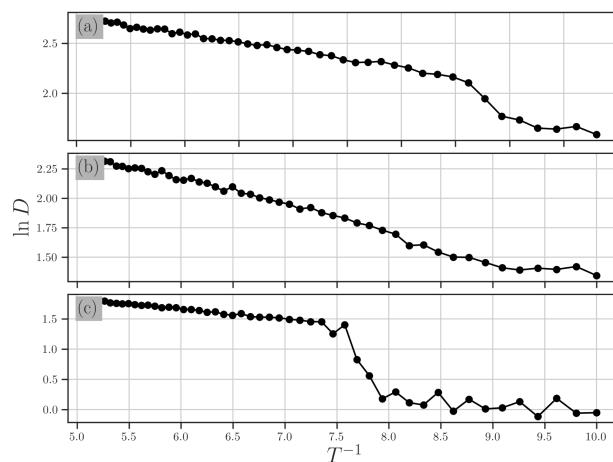


Figura 4: Difusão do sistema congelando pelo inverso da temperatura para a fase (a) Triangular, (b) Stripes e (c) Kagome.

## 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- DE OLIVEIRA, A.B.; NEVES, E.B.; GAVAZZONI, C.; PAUKOWOSKI, J.Z.; NETZ, P.A.; BARBOSA, M.C. Liquid crystal phase and waterlike anomalies in a core-softened shoulder-dumbbells system. **The Journal of Chemical Physics**, New York, v.132, n.16, p.164505, 2010.
- ALLEN, M.P.; TILDESLEY, D.J. **Computer simulation of liquids**. Reino Unido: Oxford University Press, 2017. 1v.
- CARDOSO, D.S.; HERNANDES, V.F.; NOGUEIRA, T.P.O.; BORDIN, J.R. Structural behavior of a two length scale core-softened fluid in two dimensions. **Physica A**, Europa, v.566, n.1, p.125628, 2021.
- ILHA, A.V.; BORDIN, J.R. Fusão bidimensional: uma análise computacional de estruturas cristalinas. **anais da XXIV ENPÓS**, Pelotas, v.1, n.1, p. 1-4, 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.
- Wang, Yaojia et al. Electronic Properties and Phase Transition in the Kagome Metal Yb0.5Co3Ge3. **Chemistry of Materials**, v. 34, n. 16, p. 7337-7343, 2022.
- WANG, Bin et al. Liquid–liquid phase separation in human health and diseases. **Signal Transduction and Targeted Therapy**, v. 6, n. 1, p. 290, 2021.
- XU, Shi-qi et al. Compensation temperatures and hysteresis loops of the ferrimagnetic bilayer kagome lattice with RKKY interaction. **Physica B: Condensed Matter**, v. 666, p. 415147, 2023.
- NEUPERT, Titus et al. Charge order and superconductivity in kagome materials. **Nature Physics**, v. 18, n. 2, p. 137-143, 2022.