

Formação de estruturas quasicristalinas a partir de misturas binárias

Y. M. Oliveira ^{1†}, L. G. Rizzi ^{1‡}

¹ Departamento de Física - Universidade Federal de Viçosa

[†]ygor.macedo@ufv.br, [‡]lerizzi@ufv.br

Palavras-chave: misturas binárias, discos duros, quasicristais, fator de estrutura, algoritmo de *event-chain* Monte Carlo.

Grande Área: Física

Área Temática: Física da Matéria Condensada

Categoria: Trabalho de Pesquisa

Introdução

Quando primeiramente descobertos, em 1982, os quasicristais redefiniram as convenções cristalográficas e renderam o Nobel de Química de 2011 a Dan Shechtman. Os quasicristais possuem padrões de difração que correspondem à simetrias que são essencialmente proibidas aos cristais, i.e., que não são de ordem 2, 3, 4 ou 6.

Partindo de evidências experimentais [1], consideramos sistemas de misturas binárias de discos duros com potencial

de apresentar estruturas quasicristalinas, testando a ideia de que a formação de coloides quasicristalinos tem uma origem puramente entrópica [1].

Para estudar essas misturas implementamos o algoritmo de *event-chain* Monte Carlo (ECMC), que se destaca em simulações computacionais que lidam com sistemas grandes e densamente ocupados, onde algoritmos de Monte Carlo convencionais se mostram insuficientes [2].

Objetivos

Investigar a possível formação de estruturas quasicristalinas em sistemas bidimensionais de misturas binárias de discos duros através da aplicação do algoritmo de ECMC. Obter quantidades físicas de interesse, como o fator de estrutura, que possibilita caracterizar o sistema como cristalino, quasicristalino ou amorfo e, também, possibilita o estudo de quantidades termodinâmicas referentes ao sistema.

Metodologia

Vários sistemas de diferentes frações de área $\phi_i = NA_d/A_s$ foram construídos com o ECMC, onde, i é a espécie do disco, N é o número de discos, A_d é a área do disco e A_s é a área do sistema.

O ECMC é um método de cadeia de Markov Monte Carlo para sistemas de discos duros e afins que permite deslocar uma longa cadeia de discos num único movimento, como na Fig.1.

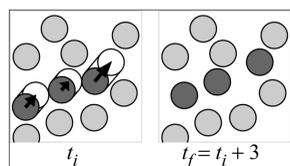


Fig.1: Dois instantes de tempo num deslocamento no ECMC. Adaptado de [3]

O fator de estrutura é dado por:

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_v \sum_\mu e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_v - \vec{r}_\mu)}. \quad (1)$$

E o fator de estrutura parcial, por:

$$S_{ij}(|\vec{q}|) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_v^{N_i} \sum_\mu^{N_j} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_v - \vec{r}_\mu)} \right\rangle, \quad (2)$$

onde $\vec{r}_{v,\mu}$ é a posição do disco v da espécie i , ou μ da espécie j ($N = N_i + N_j$) e \vec{q} é o vetor 2D do espaço- q , em que $|\vec{q}| = 2\pi/L$, onde L é o tamanho do sistema.

Além da fração de área total, $\phi_t = \phi_l + \phi_s$, atuam como parâmetros as razões $\tau = \phi_l/\phi_t$ e $\gamma = \sigma_l/\sigma_s$, onde $\sigma_{l,s}$ é o diâmetro do disco maior l , ou menor s .

Resultados e Discussão

Pela eq. (2) obtém-se a combinação linear $S_{nn} = S_{ll} + S_{ss} + 2S_{ls}$, que fornece o fator de estrutura de Bhatia-Thornton que considera a relação número-número entre os $N = N_l + N_s$ discos que compõem os sistemas [4]. A Fig.2 apresenta alguns resultados:

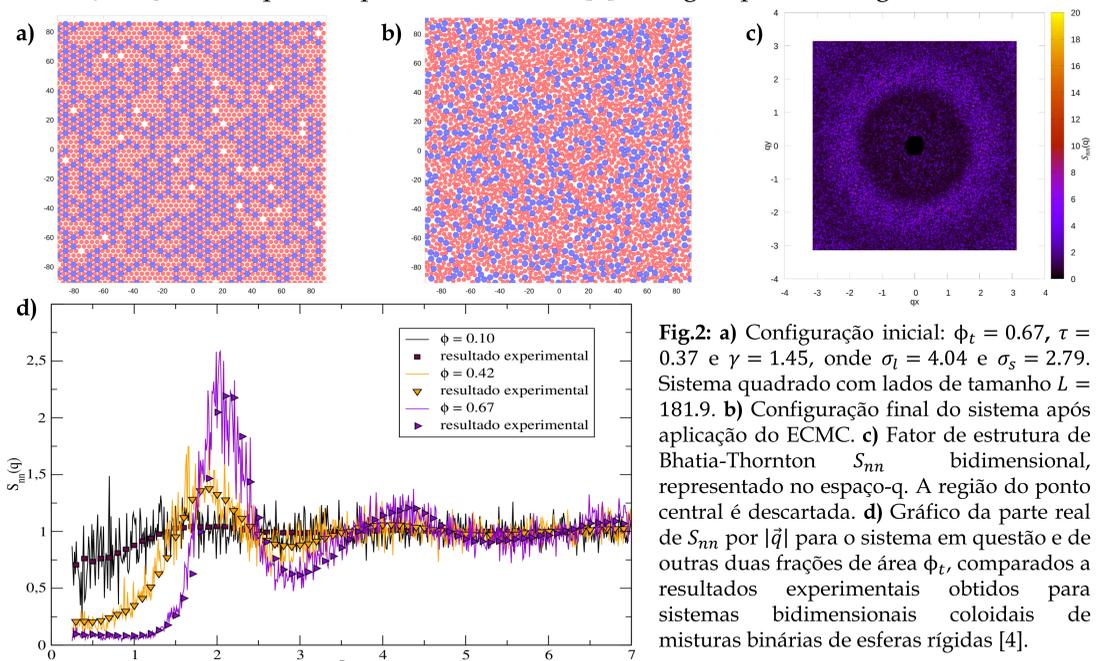


Fig.2: a) Configuração inicial: $\phi_t = 0.67$, $\tau = 0.37$ e $\gamma = 1.45$, onde $\sigma_l = 4.04$ e $\sigma_s = 2.79$. Sistema quadrado com lados de tamanho $L = 181.9$. b) Configuração final do sistema após aplicação do ECMC. c) Fator de estrutura de Bhatia-Thornton S_{nn} bidimensional, representado no espaço- q . A região do ponto central é descartada. d) Gráfico da parte real de S_{nn} por $|\vec{q}|$ para o sistema em questão e de outras duas frações de área ϕ_l , comparados a resultados experimentais obtidos para sistemas bidimensionais coloidais de misturas binárias de esferas rígidas [4].

Conclusões

Para os sistemas analisados neste estudo, encontramos que a configuração final não apresenta uma fase quasicristalina global. De fato, a Fig.2c) revela um padrão de difração de substância amorfa, pois não é composta de pontos discretos brilhantes dispostos de forma simétrica.

Todavia, a metodologia empregada foi capaz de produzir fatores de estrutura de Bhatia-Thornton que possuem boa

correspondência com dados obtidos experimentalmente, como mostra a Fig.2.d).

Como perspectiva para encontrar quasicristais ficam a exploração cuidadosa dos parâmetros ϕ_t , τ e γ e da conexão entre os fatores de estrutura de Bhatia-Thornton com certas quantidades termodinâmicas dos sistemas, que podem ser obtidas no limite $q \rightarrow 0$ [4].

Bibliografia

- [1] D.V. Talapin, E.V. Shevchenko et al., *Nature* **461**, 964-967, (2009).
- [2] E.P. Bernard e W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **107** (15), 155704 (2011).
- [3] E.P. Bernard, W. Krauth e D.B. Wilson, *Phys. Rev. E* **80** (5), 056704 (2009).
- [4] A.L. Thorneywork et al., *Molecular Physics* **116**, 3245 (2018).

Apoio Financeiro

PIBIC-UFV/



Agradecimentos

Grupo de Investigação de Sistemas Complexos - GISC/DPF.
Instituições de fomento a pesquisa: FAPEMIG, CAPES e CNPq.