

Métodos de modelagem computacional atômico aplicado ao estudo de materiais

Marcos V S Rezende, Jomar B Amaral, Romel M Araujo e Mário Ernesto Giroldo Valerio

Universidade Federal de Sergipe - UFS/Brasil
(mvalerio@ufs.br)

Com o desenvolvimento de computadores e métodos cada vez mais eficiente, a modelagem computacional vem se tornando um método bastante eficaz e utilizado em diversas áreas de pesquisas, principalmente nos estudos das propriedades de materiais. Objetivo central dessas técnicas é prever o comportamento dos sistemas sólidos e dos defeitos nas propriedades desses sistemas. Dentre as mais utilizadas, temos os métodos atômicos, baseados nas teorias clássicas. As técnicas clássicas podem ser divididas em três categorias: (i) Técnicas de modelagem estáticas, nas quais os efeitos térmicos não são incluídos; (ii) Técnicas de dinâmica molecular, que incluem explicitamente os efeitos térmicos através da solução das equações de movimento de Newton; (iii) Técnicas de Monte Carlo, que baseiam-se em métodos estatísticos de amostragem e sorteio. Inúmeros métodos de simulação clássica estática foram desenvolvidos para estudo das propriedades dos materiais. Atualmente, são bastante utilizados o código GULP (*General Utility Lattice Program*), desenvolvido por Julian Gale, para simulações estruturais e de cálculo de defeitos pontuais, e também o código METADISE (*Minimum Energy Techniques Applied to Dislocation, Interface, and Surface Energies*), desenvolvido por Stephen C. Parker, para cálculo de superfície, interface e morfologia. Dentre as aplicações podemos citar: i- estabilidade de estrutura e fases cristalinas de materiais iônicos e covalentes; ii- cálculos de propriedades elásticas, dielétricas, piroelétricas, entre outras; iii- estudo de defeitos intrínsecos e extrínsecos gerado por íons dopantes; iv- estudo dos mecanismos de migração de defeitos através da rede cristalina; e v- estudo da contaminação de íons oriundos da atmosfera nos materiais. Os métodos de simulação de superfície, por outro lado, podem ser usados para prever qual a superfície é mais estável e qual a terminação de íons nessas superfícies seguidos pela previsão da morfologia do material e o efeito de dopantes na morfologia. Estes métodos podem ainda fornecer informações sobre a segregação de dopantes quando analisamos as modificações no balanço energético em relação a distância do dopante em relação a superfície do material. Efeitos de concentração de dopantes na superfície também podem ser modelados. Neste minicurso abordaremos as bases destes dois principais métodos de simulação aplicados a materiais e discutiremos exemplos de combinação dos resultados experimentais com as previsões dos modelos.