

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO À PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE BOLSA DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

FUNÇÃO DE AUTOCORRELAÇÃO DE VELOCIDADE: UM
ESTUDO VIA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Bolsista: Janete Cristina Verçosa Ferreira, CNPq

Manaus - 2010

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO À PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE BOLSA DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

RELATÓRIO FINAL

PIB-E/0065/2009

FUNÇÃO DE AUTOCORRELAÇÃO DE VELOCIDADE: UM
ESTUDO VIA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Bolsista: Janete Cristina Verçosa Ferreira, CNPq

Orientador: Prof Dr Denilson da Silva Borges

Manaus - 2010

Resumo

O projeto tem como objetivo gerar via simulação computacional a função de autocorrelação de velocidades, $z(t)$ através de um programa na linguagem de programação FORTRAN, assim entender os comandos utilizados e obter a simulação.

Para chegar a esse resultado foi necessário estudar mecânica estatística e dinâmica molecular e obter os cálculos da função de autocorrelação de velocidade.

Para conseguir um bom resultado é importante ter um pouco de conhecimento da linguagem de programação FORTRAN. Terminando todas essas etapas o programa irá simular a função de autocorrelação de velocidade, $z(t)$, onde é uma ferramenta utilizado no método de Dinâmica Molecular para calcular as propriedades dinâmicas de um sistema.

Sumário

Resumo	ii
Introdução	1
Metodologia	4
Resultados Obtidos	5
Conclusão	8
Referências Bibliográficas	9
APÊNDICE	10

Lista de Figuras

1	Movimento oscilatório e amortecido	6
2	Gráfico da função de autocorrelação de velocidades, $Z(t)$,	7
3	Cronograma de estudo	10

Introdução

A mecânica estatística é a aplicação da estatística, que usa a matemática como ferramenta para descrever grandes sistemas, para o campo da mecânica, que tem interesse no movimento das partículas quando sujeitas a uma força, que é o caso da Dinâmica Molecular. Fornece uma estrutura que relaciona as propriedades microscópicas de átomos e de moléculas individuais às propriedades macroscópicas dos materiais que podem ser observados, explicando conseqüentemente a termodinâmica como um resultado natural da estatística e da mecânica clássica e quântica. Em particular, podemos usar os cálculos das propriedades termodinâmicas dos materiais através dos dados espectroscópicos de átomos ou moléculas individuais.

Atualmente, através de computadores e com o desenvolvimento da paralelização de algoritmos, a simulação computacional tem se constituído como uma ferramenta essencial de cálculo, tanto para experimentais como para teóricos. Mediante um bom modelo do sistema físico, não só podemos reproduzir experimentos de laboratório como podemos ir mais além, uma vez que podemos variar livremente os parâmetros usados, isso permite provar (ou não) modelos teóricos existentes dentro de um alcance de parâmetros impossíveis de serem alcançados até o momento, por exemplo, condições termodinâmica extremas, resolvendo assim o elo entre explicações teóricas e observações. Não somente obtemos dados numéricos que podem ser comparados com os resultados experimentais e previsões teóricas, mas também podemos obter uma imagem gráfica do processo em questão. Apartir dos dados obtidos da mecânica estatística podemos gerar via simulação computacional a função de autocorrelação de velocidades, $Z(t)$.

Revisão Bibliográfica

Momento de um Fônon

Os fônons equivalem a um tipo especial de movimento vibratório, conhecido como modos normais de vibração em mecânica clássica, em que cada parte de uma rede oscila com a mesma frequência.

Um fônon de vetor de onda k interage com partículas como fótons, nêutrons e elétrons como se tivesse um momento $\hbar k$. Entretanto, um fônon não possui nenhum momento.

O Método de Dinâmica Molecular

O objetivo básico da técnica de Dinâmica Molecular é observar a evolução do sistema dado através da determinação do movimento das partículas individuais. Calculamos a trajetória de fase do sistema que obedece a dinâmica de Newton.

Funções de Correlações

O conhecimento do espaço de fase permite-nos obter além das propriedades estruturais do sistema e todas as propriedades dinâmicas que se queira.

A função de autocorrelação de velocidade (VAF) normalizada é definida como

$$Z_\alpha(t) = \frac{\langle \vec{v}_{i\alpha}(t) \vec{v}_{i\alpha}(0) \rangle}{\langle |\vec{v}_{i\alpha}(t)|^2 \rangle} \quad (1)$$

sendo $\vec{v}_{i\alpha}(t)$ a velocidade da partícula i do tipo α no tempo t . A densidade de estados vibracionais de fônons, $G(\omega)$, pode ser obtida através de transformada de Fourier da função de autocorrelação de velocidades, ou seja,

$$G_\alpha(\omega) = \frac{6N_\alpha}{\pi} \int_0^\infty z_\alpha(t) \cos(\omega t) dt \quad (2)$$

O valor finito de $G(\omega)$, para $\omega = 0$, está relacionado com a constante de auto-difusão dada por

$$D_\alpha = \frac{k_B T}{m_\alpha} \int_0^\infty Z_\alpha(t) dt \quad (3)$$

Métodos Utilizados

Para chegar a finalização desse projeto tivemos que fazer um levantamento bibliográfico, sobre os assuntos relacionado ao tema.

Feito esse levantamento, os estudos passaram à mecânica estatística e uma introdução à física do estado sólido, sobre o conceito de fônons.

Com as primeiras etapas realizadas adentramos no estudos de dinâmica molecular, para seguir como os calculos da função de autocorrelação, e finalizar com o estudo do programa fonte.

Resultados Obtidos

O projeto baseou-se no estudo sistemático de uma subrotina (programa-ztvv.f) em linguagem de programação Fortran, a subrotina é composta por comandos importantes, como, a caixa de simulação (a_0, b_0, c_0) , número de etapas em função de correlação (NSVV0), número de origens do tempo em paralelo (mtop), tempo inicial e os valores específicos de cada composto.

A subrotina calcula através das velocidades das partículas a função $z(t)$, em relação as demais partículas, ou seja, mede a correlação de uma partícula entre o tempo inicial e final.

Com todos os dados a subrotina está pronta para funcionar, ela mostra os resultados da função $z(t)$, através deles encontramos um gráfico da função de auto-correlação de velocidade em função do tempo Figura 2. Como um exemplo, para comparar com o nosso resultado, a figura 1, nos mostra a função de correlação de velocidades para o caso de um gás ideal, note que para o nosso caso, composto ZnTe à temperatura ambiente, encontra-se de acordo com os resultados de um gás ideal mostrado com o gráfico que representa o movimento amortecido.

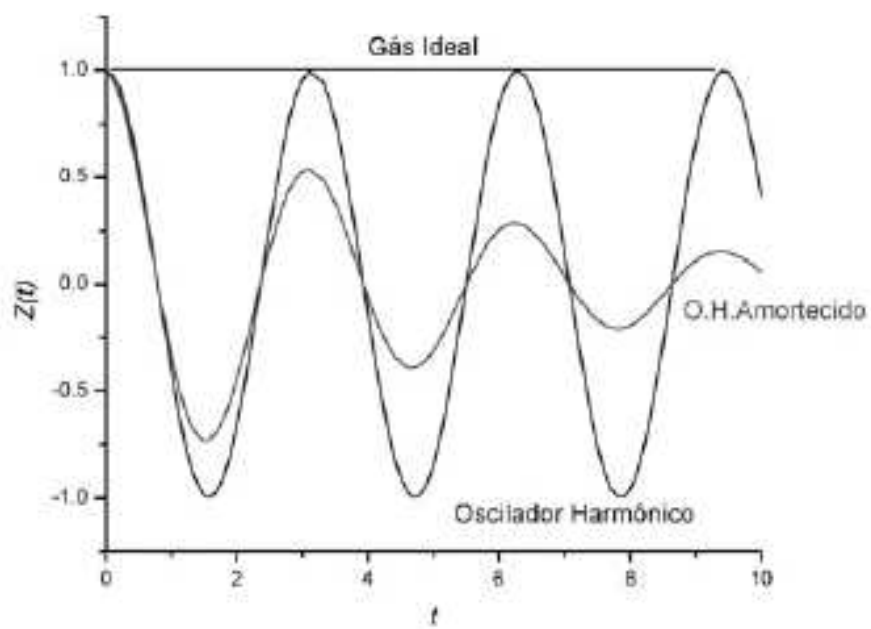


Figura 1: Movimento oscilatório e amortecido

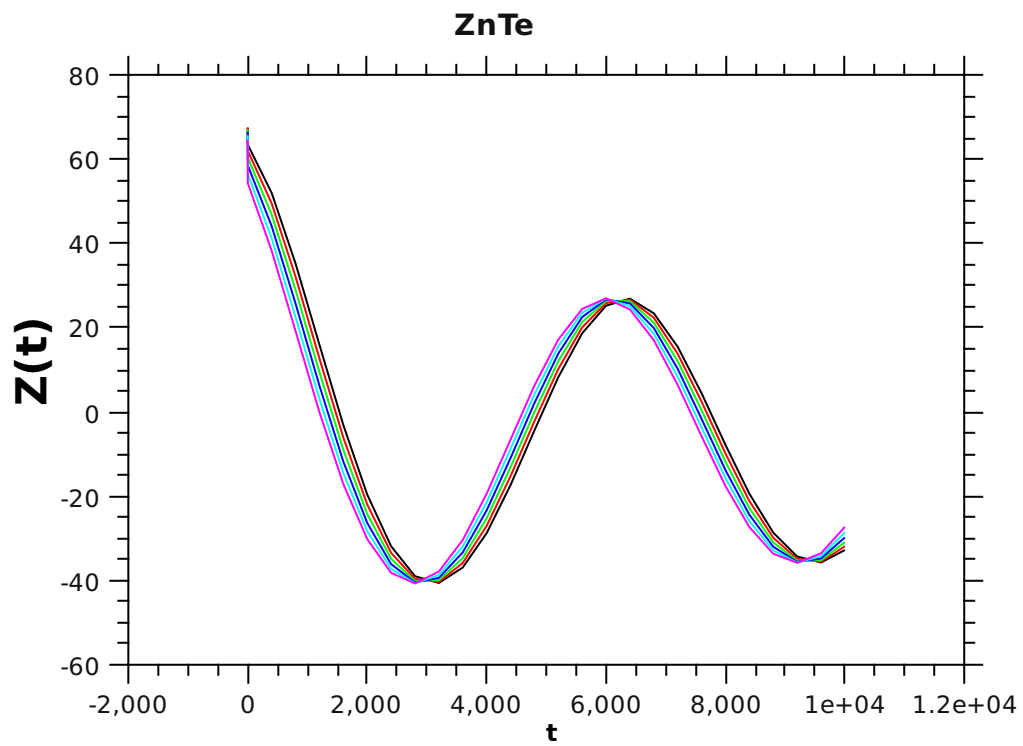


Figura 2: Gráfico da função de autocorrelação de velocidades, $Z(t)$, para o composto ZnTe. Resultado de nossa simulação.

Conclusão

O estudo de função de autocorrelação de velocidade, $z(t)$, que realizamos uma subrotina na linguagem de programação fortran, é uma função muito útil no método de Dinâmica Molecular, a mesma server para calcular as propriedades dinâmicas de um determinado sistema. Através da transformada de fourier dessa função é possível realizar análises dos modos normais de vibração de um sólido, líquido ou amorfo. Dessa forma, o projeto alcançou o seu objetivo principal que foi gerar uma subrotina em fortran para calcular a função de autocorrelação de velocidade $Z(t)$.

Referências Bibliográficas

- [1] KITTEL, Charles. Introdução a Física do Estado Sólido; tradução Ronaldo Sérgio de Biasi. -Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- [2] RINO, José Pedro; STUDART, Nelson. Um Potencial de Interação para o Estudo de Materiais e Simulações por Dinâmica Molecular. UFSC- DF. São Carlos- SP, 2001.
- [3] VOLCHAN, Sérgio B. A Probabilidade na Mecânica Estatística Clássica. PUC-RJ. Rio de Janeiro- RJ. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 28, n. 3, p. 313-318, 2006.

APÊNDICE

Cronograma

Nº	Descrição	Ago 2009	Set	Out	Nov	Dez	Jan 2010	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul
1	Levantamento bibliográfico da função de autocorrelação de pares	X	X										
2	Estudo de Mecânica Estatística			X	X	X							
3	Estudo de Dinâmica Molecular						X	X	X				
4	Estudo do Programa (código fonte) de Dinâmica Molecular									X	X	X	
5	-Elaboração do Resumo e Relatório Final (atividade obrigatória)											X	
6	-Preparação da apresentação Final para o Congresso (atividade obrigatória)												X

Figura 3: Cronograma de estudo