



XXXIV ENCONTRO DE JOVENS PESQUISADORES,
XVI MOSTRA ACADÊMICA DE INOVAÇÃO E TECNOLOGIA e
I MOSTRA DE EXTENSÃO: CONEXÕES ENTRE
UNIVERSIDADE E COMUNIDADE.



MODELO SIMPLIFICADO PARA EXPLORAÇÃO DA RELAÇÃO ENTRE A EXPANSÃO TÉRMICA NEGATIVA E A AMORFIZAÇÃO INDUZIDA POR PRESSÃO EM MATERIAIS

Anderson Pastore Rizzi (PROBIC-FAPERGS), Cláudio Antônio Perottoni, André Luis Martinotto (Orientador(a))

Alguns sólidos cristalinos exibem comportamentos anômalos, como a expansão térmica negativa, em que o material se contrai ao ser aquecido, e a amorfização induzida por pressão, em que a compressão transforma o cristal em sólido amorfo sem passagem pela fase líquida. Em estruturas de rede abertas e flexíveis, como o tungstato de zircônio, ambos os fenômenos têm sido associados a modos vibracionais de baixa energia, sugerindo uma origem física comum. Este trabalho investiga essa conexão por meio de um modelo mínimo, livre da complexidade estrutural de materiais reais. O modelo considerado é uma cadeia unidimensional de átomos cujos vizinhos interagem por um potencial de poço duplo assimétrico, fortemente anarmônico. Em cada ligação, esse potencial admite dois comprimentos de equilíbrio distintos, e a redistribuição entre eles com a temperatura e com a tensão aplicada é o mecanismo que se pretende relacionar à expansão térmica negativa e à amorfização. Como a cadeia anarmônica não admite solução analítica, as propriedades termodinâmicas serão obtidas por dinâmica molecular por integrais de caminho, que preserva os efeitos quânticos nucleares, em especial o movimento de ponto zero e o tunelamento. A confiabilidade do método será avaliada por comparação com a solução numérica exata da equação de Schrödinger para um único oscilador e com resultados de teoria da perturbação obtidos para sistemas fracamente anarmônicos. A partir das simulações, pretende-se determinar a energia livre, a entropia (vibracional e configuracional) e o calor específico em função da temperatura, além do comprimento médio de ligação, do qual se obtém o coeficiente de expansão térmica. Serão investigadas ainda a resposta estrutural sob tensão e a possível ocorrência de amorfização, bem como o efeito de um resfriamento rápido sobre a fase desordenada resultante. O objetivo central é verificar se a expansão térmica negativa e a amorfização emergem simultaneamente do potencial de poço duplo, de modo a testar a hipótese de uma origem física comum para os dois fenômenos.

Palavras-chave: Expansão Térmica Negativa, Amorfização Induzida por Pressão, Dinâmica Molecular por Integrais de Caminho

Apoio: UCS, FAPERGS