CARACTERIZAÇÃO DO HIDROGÊNIO METÁLICO VIA DINÂMICA MOLECULAR CLÁSSICA.

Nicolly Manuely Zanolla Benk (PIBIC/FA), Lucas Stori de Lara (Orientador), e-mail: lslara@uepg.br

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Física.

Ciências Exatas e da Terra - Física da Matéria Condensada.

Palavras-Chave: *hidrogênio, simulação computacional, dinâmica molecular.*

Resumo

O hidrogênio líquido no núcleo de grandes planetas e estrelas anãs marrons sofre uma transição de fase para um estado metálico condutor. A pesquisa sobre essa transição enfrenta desafios experimentais devido às condições extremas necessárias e à dificuldade de confinar o hidrogênio para medições. Simulações computacionais têm sido fundamentais para entender o as fases do hidrogênio.

Introdução

O hidrogênio metálico pode revolucionar a supercondução a temperatura ambiente. A transição líquido-líquido (LLT) é crucial para simular a estrutura e evolução de planetas gigantes como Júpiter, que apresentam uma mudança abrupta de densidade entre um manto metálico interno e outro isolante externo. Devido a grandes dificuldades experimentais, utilizam-se diversas teorias da estrutura eletrônica, desde métodos de Monte Carlo Quântico e a conhecida aproximação da Teoria do Funcional da Densidade até métodos de dinâmica molecular clássica, apresentada neste trabalho.

Materiais e Métodos

Foram feitos estudos por revisões bibliográficas, através de sites como The Harvard Gazette, New Scientist e Prisma - À Luz da Física: os planetas do sistema solar e a utilização do programa de simulação computacional LAMMPS.

Resultados e Discussão

Resumidamente, através de simulações, obtivemos os resultados do gás hidrogênio em pressões diversas, obtendo uma fase sólida e uma estrutura cristalina, conforme vista na figura 1. Nota-se que as variações de pressões da ordem de 1 atm até 50000 atm, provocam alterações estruturais profundas no comportamento das moléculas de hidrogênio, passado de uma fase gasosa até atingir uma fase cristalina. Na figura 2, quantificamos as propriedades estruturais para as moléculas de hidrogênio através da distribuição radial de pares, g(r). É através da forma destas curvas que podemos estimar as diferentes fases do hidrogênio. Nas fases cristalinas, a g(r) se apresenta com diversos picos enquanto nas gasosas, apenas um pico característico é observado.

Figura 1. Hidrogênio molecular em diferentes pressões.

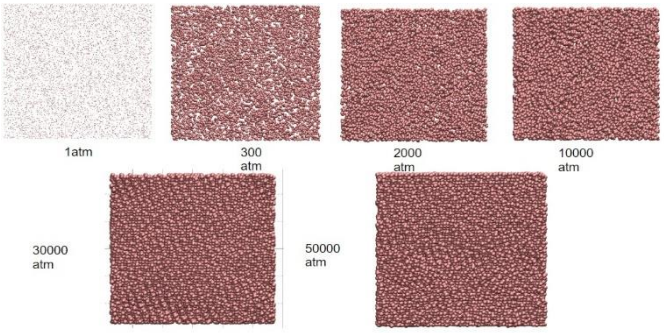
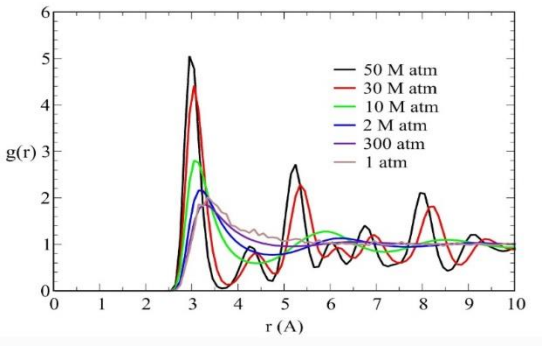


Figura 2. Gráfico g(r) da distribuição radial de pares.



Conclusão

Foi possível obtermos as propriedades estruturais para as moléculas de hidrogênio através das medidas da g(r), via simulações de dinâmica molecular clássicas. Tais resultados são comparáveis aos experimentais disponíveis até o momento.

Agradecimentos

Agradecimentos à UEPG, por disponibilizar os computadores do laboratório e à Fundação Araucária pelo apoio financeiro essencial à realização deste trabalho.

REUELL, Peter. WANG, Kai-Jae. Advance in high-pressure physics. **The Harvard New Gazette**. 2017. Disponivel em: https://news.harvard.edu/gazette/story/2017/01/a-breakthrough-in-high-pressure-physics. Acesso em: 30 out. 2023.

MADEIRA, Lucas. VITIELLO A., Silvio. A função radial de distribuição de pares para sistemas Lennard-Jones bidimensionais. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 34, n. 4, 4303 (2012). Disponível em: www.sbfisica.org.br. Acesso em: 30 jul. 2024.

ISSN 1676-0093