

Análise de uma folha de grafeno usando dinâmica molecular

Analysis of a graphene sheet utilizing molecular dynamics

RESUMO

O grafeno é um material que recentemente tem ganhado muita atenção da comunidade científica devido à diversas propriedades vantajosas, como boa condutividade térmica e elétrica e alta resistência mecânica. Para melhor entender o funcionamento de dispositivos aplicando esse material pode ser usado simulações de dinâmica molecular, que é um método computacional para análise de sistemas químicos. Com ele podemos obter diversas informações sobre um dado sistema, como pressão, temperatura e posição de partículas, o que ajuda a melhor compreender os mecanismos que o rege, analisar qual o efeito de pequenas variações nele e obter informações que seriam difíceis de extrair de um experimento real. Neste trabalho consta um tutorial simples de como utilizar o Lammmps, um software que efetua esse tipo de simulação, além de um exemplo de aquecimento de uma folha de grafeno e análise dos resultados obtidos em diferentes temperaturas.

PALAVRAS-CHAVE: Grafeno. Dinâmica Molecular. Métodos De Simulação.

ABSTRACT

Graphene is a material that has recently gained a lot of attention from the scientific community due to its several advantageous properties, such as good thermal and electrical conductivity and high mechanical resistance. For a better understanding of the functioning of the devices utilizing this material, molecular dynamics simulations can be used, which is a computational method for analyzing chemical systems. With it we can obtain various informations about a given system, such as pressure, temperature and position of particles, which helps with better understanding the mechanisms that govern it, analyze the effect of small variations on it and obtain informations that would be difficult to extract from a real experiment. This work contains a simple tutorial on how to use Lammmps, a software that performs this type of simulation, as well as an example of heating a graphene sheet and analyzing the results obtained at different temperatures.

KEYWORDS: Graphene. Molecular Dynamics. Simulation Methods.

Alexandre Graeff Silverio

silverioale@hotmail.com

Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

Wilson José da Silva

wilsonjsilva@utfpr.edu.br

Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

Anderson Emanuel Ximim Gavim

agavimfisica@gmail.com

Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

Recebido: 19 ago. 2020.

Aprovado: 01 out. 2020.

Direito autorial: Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.



INTRODUÇÃO

O grafeno é um material muito versátil, e tem sido estudado para aplicações como capacitores, transistores, sensores, devido a suas diversas propriedades vantajosas. Para auxiliar o desenvolvimento de dispositivos empregando esse e outros materiais, podem ser usados métodos computacionais para obter resultados sem precisar de um experimento real, melhor entender que efeitos esses materiais tem sobre o dispositivo, e como o dispositivo pode ser melhorado. Nesse trabalho consta a análise do aquecimento de uma folha de grafeno, simulado utilizando o software lammps. Também são utilizados os softwares ovito para visualizar o sistema após a simulação e atomsk para gerar a folha de grafeno.

MATERIAIS E MÉTODOS

Lammps, acrônimo para Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator é um software de dinâmica molecular de licença livre e código aberto, desenvolvido pela Sandia National Laboratories, que simula sistemas químicos reduzindo os átomos que o compõem a partículas newtonianas, com posição; velocidade; ID, que identifica partícula; e tipo, ou seja, qual a espécie do átomo. Outras características, como carga, podem ser armazenadas utilizando o comando `atom_style`.

Utilizando as posições e equações de força, definidas pelo comando `pair_style`, as velocidades dos átomos são corrigidas, e, em um pequeno intervalo de tempo, dependente do comando `timestep` e `units`, onde as forças são supostas constantes, o sistema ajusta as posições dos átomos, e assim sucessivamente, até que condições limite sejam alcançadas.

Para efetivamente simular o sistema é necessário usar ou o comando `minimize`, onde é feita uma minimização da energia do sistema, ou o comando `fix`, onde é possível controlar diversas variáveis do sistema, como pressão e temperatura, dependendo de qual `fix` específico é utilizado.

Para obter os dados da simulação, dois comandos podem ser utilizados. Um deles, o comando `thermo`, que mostra no console as informações termodinâmicas do sistema, como energia e temperatura. Quais informações são mostradas podem ser escolhidas pelo comando `thermo_style`. O outro, o comando `dump`, salva as posições das partículas em um arquivo no diretório do arquivo de entrada. Com esse arquivo, é possível visualizar o sistema em outros softwares, como o ovito, em diferentes etapas da simulação.

Rodar o LAMMPS requer que você coloque os comandos da simulação em um arquivo de texto, e, no caso do windows, navegar até o diretório onde está salvo o arquivo com o prompt de comando e executar o comando `lmp_serial.exe -in [arquivo]`, substituindo `[arquivo]` pelo nome do arquivo com a extensão dele (`.txt`, `.doc` ou qualquer outro).

O arquivo de entrada do lammps utilizado é que consta na seguinte imagem.

Imagem 1 – Arquivo de entrada do lammps

```
units          metal
dimension     3
processors    * * *
boundary      m m m
newton        on

#####

atom_style    atomic
read_data    grafi.lmp
pair_style    tersoff
pair_coeff    * * coeffs.tersoff C

#####

minimize      1.0e-7 1.0e-7 10000 100000
velocity      all create 300.0 4928459 rot yes dist gaussian

thermo        100
thermo_style  custom temp etotal pe ke epair

dump          id all atom 100 dump.carbon

fix           1 all nve
fix           2 all temp/berendsen 300 500 1
run           20000
unfix        2
unfix        1
```

Fonte: Autoria própria (2020).

O arquivo está separado em 3 partes para simplificação. Na primeira estão comandos relativos ao processo geral da simulação, no segundo estão os comandos relativos aos átomos e suas interações, e no terceiro informações sobre a simulação em si. O comando mais importante é o último fix, que eleva a temperatura de 300 para 500 Kelvin ao longo de 20000 passos. Também foram realizadas simulações para aquecimentos até 1000, e 10000 Kelvin. Essas temperaturas foram escolhidas para representar um leve aquecimento, um aquecimento muito vigoroso e uma temperatura absurdamente alta, respectivamente, com o objetivo de analisar qual seria o comportamento do sistema em cada uma dessas condições.

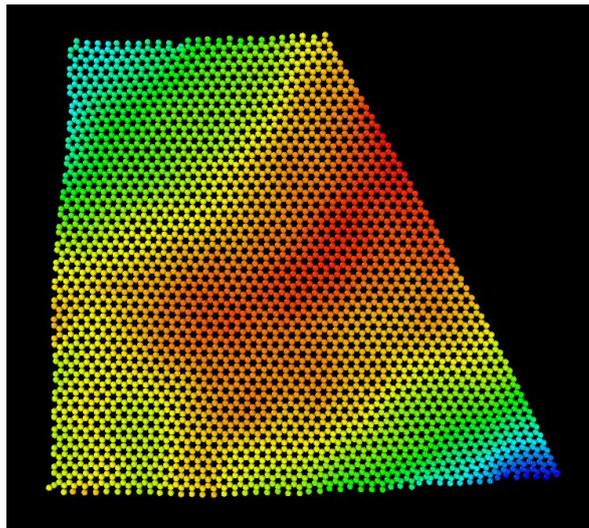
A folha de grafeno foi gerada utilizando o software atomsk com o comando, no powershell do windows &"caminho" --create graphite 1.42 3.35 C -duplicate 5 5 0 -cut above 1 z lammps grafeno . Este comando cria uma célula unitária de grafite, com distância de 1.42 Å entre átomos e 3.35 Å entre folhas, faz com que os átomos sejam de carbono, aumenta essa célula 5 vezes nos eixos x e y, remove os átomos da segunda folha (com z maior que um), faz esse arquivo ficar em formato aceito pelo lammps e chama esse arquivo de grafeno.lmp. O caminho entre aspas deve ser substituído pelo caminho do executável do atomsk, sendo que as aspas são necessárias.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Utilizando o arquivo dump e o visualizando através do ovito é possível observar o comportamento da folha em diversas temperaturas. Quando em 500 Kelvin, ela continua estável, mantendo sua estrutura e forma em grande parte. Já em uma temperatura de 1000 Kelvin, é possível observar a folha se dobrando devido ao acúmulo de pequenas dobras geradas pela maior velocidade dos átomos. Caso a temperatura seja elevada para 10000 Kelvin, a folha se decompõe por completo, visto que a energia atrativa dos átomos se torna insuficiente para manter a estrutura da folha.

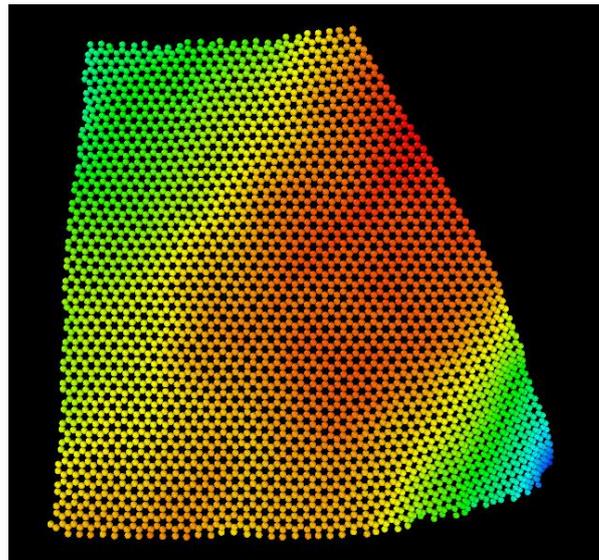
A vibração da folha também aumenta consideravelmente com a temperatura. As ondas geradas na folha pelos movimentos dos átomos se tornam muito mais visíveis, devido a maior energia dos átomos, que acarreta numa maior oscilação.

Imagem 2 - Folha de grafeno a 500 K. A escala de cor representa a posição no eixo z, com uma pequena diferença total de 28 Å.



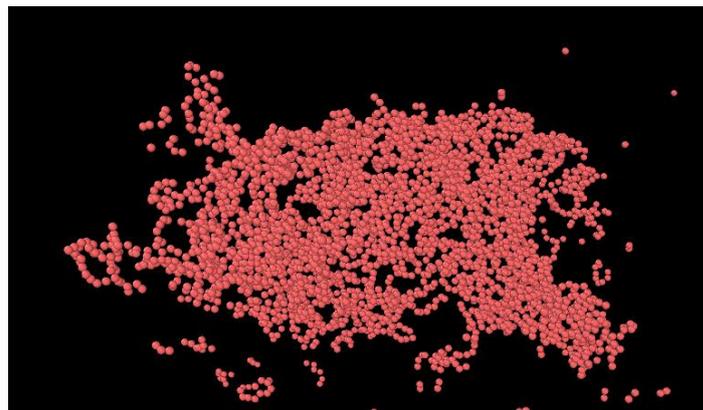
Fonte: Autoria Própria (2020).

Imagem 3 - Folha de grafeno a 1000 K. A diferença de altura já se torna 35 Å.



Fonte: Autoria Própria (2020).

Imagem 4 - Folha de grafeno a 10000K. A folha se encontra totalmente desfeita.



Fonte: Autoria Própria (2020).

Também é possível obter, através do comando thermo_style, os níveis de energia cinética, relacionada ao movimento individual dos átomos, e potencial, relacionada à interação interatômica. Abaixo estão os valores para as temperaturas.

Tabela 1 – Valores obtidos pela simulação.

Temperatura obtida [K]	Energia cinética [eV]	Energia potencial [eV]
298,71	144,75	-26986
481,37	233,27	-26898
946,07	444,6	-26664

Fonte: Autoria própria (2020)

Sabendo que a simulação foi feita usando 3750 átomos, tem-se que a folha possui uma média de $-7,2$ eV/átomo de energia potencial, o que condiz com

estudos similares. Disso podemos afirmar que o modelo de campo de força escolhido e valores para os coeficientes estão corretos.

Também se nota uma relação entre a energia cinética e a temperatura, porém, devido aos diversos tipos de graus de liberdade que o sistema apresenta, a análise da relação entre as duas se torna complexa e não é realizada nesse trabalho, porém podem ser realizadas em trabalhos futuros.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesse trabalho foi feita uma análise sobre um filme simples de grafeno sob aquecimento utilizando métodos computacionais. Os resultados obtidos ajudam a melhor entender dispositivos baseados nesses fenômenos, e os métodos usados podem ser usados para inúmeros outros dispositivos, fenômenos e materiais.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi possível devido ao auxílio do CNPq.

REFERÊNCIAS

ALVI, Farah; RAM, Manoj K.; BASNAYAKA, Punya A.; STEFANAKOS, Elias; GOSWAMI, Yogi; KUMAR, Ashok. Graphene–polyethylenedioxythiophene conducting polymer nanocomposite based supercapacitor. *Electrochimica Acta*, v. 56, n. 25, p. 9406-9412, out. 2011. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013468611012254>. Acesso em: 02 set. 2020.

OVITO. Open visualization tool. Disponível em: <https://www.ovito.org/>. Acesso em 02/09/2020

SANDIA LABORATORIES. LAMMPS Documentation. Disponível em: <https://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>. Acesso em 02/09/2020

SANDIA LABORATORIES. LAMMPS Molecular dynamics simulator. Disponível em: <https://lammps.sandia.gov/>. Acesso em 02/09/2020

SCHWIERZ, Frank. Graphene transistors. *Nature Nanotechnology*, v. 5, n. 7, p. 487-496, 30 maio 2010. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/nnano.2010.89>. Acesso em: 02 set. 2020.

UNIVERSITÉ DE LILLE. AtomsK. Disponível em: <https://atomsk.univ-lille.fr/>. Acesso em 02/09/2020

YOON, Hyeun Joong; JUN, Do Han; YANG, Jin Ho; ZHOU, Zhixian; YANG, Sang Sik; CHENG, Mark Ming-Cheng. Carbon dioxide gas sensor using a graphene sheet. **Sensors And Actuators B: Chemical**, v. 157, n. 1, p. 310-313, set. 2011. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0925400511002310>.

Acesso em: 02 set. 2020.

YOON, T. L.; LIM, T. L.; MIN, T. K.; HUNG, S. H.; JAKSE, N.; LAI, S. K.. Epitaxial growth of graphene on 6H-silicon carbide substrate by simulated annealing method. **The Journal Of Chemical Physics**, v. 139, n. 20, p. 204702-204715, 28 nov. 2013. Disponível em: <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4832043>.

Acesso em: 02 set. 2020.

YU, Pingping; ZHAO, Xin; HUANG, Zilong; LI, Yingzhi; ZHANG, Qinghua. Free-standing three-dimensional graphene and polyaniline nanowire arrays hybrid foams for high-performance flexible and lightweight supercapacitors. **J. Mater. Chem. A.**, v. 2, n. 35, p. 14413-14420, 2014. Disponível em:

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/TA/C4TA02721C>. Acesso

em: 02 set. 2020.

ZHANG, Xiong; ZHANG, Haitao; LI, Chen; WANG, Kai; SUN, Xianzhong; MA, Yanwei. Recent advances in porous graphene materials for supercapacitor applications. **Rsc Adv.**, v. 4, n. 86, p. 45862-45884, 3 set. 2014. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/265300326_Recent_Advances_in_Porous_Graphene_Materials_for_Supercapacitor_Applications. Acesso em: 02 set. 2020.