

Resumo

Este projeto se insere no contexto de Termocronologia por Traços de Fissão. Traços latentes são formados pela passagem de fragmentos de fissão em minerais, tais como apatita. A passagem destes fragmentos causa um aumento local de temperatura no mineral, *thermal spikes*, desarranjando sua estrutura cristalina. O objetivo era simular esses *thermal spikes*, para isso gerou-se um cristal de fluorapatita do programa DL_POLY 4 e fez-se o *thermal spikes* nessa nanoestrutura mudando a energia cinética de um conjunto de átomos ao redor de um cilindro definido com um raio de 6 μm simulando assim um traço de fissão.

Introdução



Figura 1

Traços de fissão em uma amostra de apatita. Extraída de [1]

Quando traços de fissão (partículas alfa por exemplo) que decaem dos materiais radioativos existentes na natureza passam por uma estrutura cristalina, forma-se nessa região um traço de fissão. Os átomos dessa rede cristalina podem trocar de posição ou mudar de distância em relação aos vizinhos e isso é chamado de defeito. Com o estudo do comprimento dos traços de fissão em função da temperatura e do tempo é possível montar a história térmica do mineral, que além de dizer qual é a idade dele nos diz por quais temperaturas ele passou e isso é de grande interesse geológico.

Teoria

Observa-se que o comprimento de um traço de fissão (da ordem de 16 μm) é fortemente dependente da temperatura e que ele também diminui com o tempo. O aquecimento de amostras de apatita é chamado de “annealing”, notou-se pelos dados experimentais que quando $L/L_0 < 0.65$, onde L_0 é o comprimento inicial do traço e L é o comprimento durante o “annealing” o traço se “despedaçava” em porções descontínuas. Um modelo para explicar esse fenômeno assim como para encontrar uma equação que relaciona a temperatura, tempo e comprimento do traço de fissão foi desenvolvida em [2]. Basicamente essa teoria assume que a passagem do traço de fissão pela rede cristalina cria uma barreira de potencial que impede os átomos de voltarem as suas posições originais instantaneamente, mas segundo a mecânica quântica mesmo que a energia cinética de um átomo seja menor que a da barreira é possível ele vencer ela por efeito tunel. A equação é dada por:

$$\frac{L}{L_0} = \exp[-n \exp[-w'(U_0 - \sum_j A_j [\ln(t)]^j - K_b T)^{(1/2)}}]$$

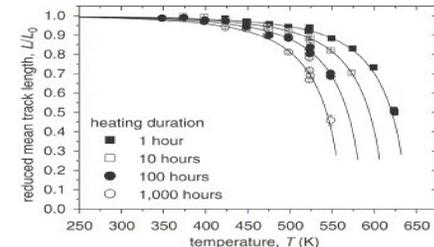


Figura 2

Resultados do “annealing” para os traços de fissão em Durango apatita. Os pontos representam os dados experimentais achados na literatura e [3] e as linhas contínuas representam o fit do modelo. [2]

Simulação

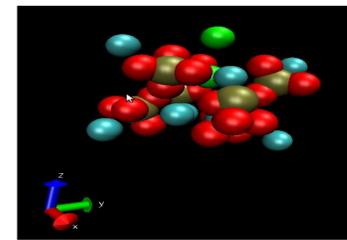


Figura 3

Visualização da molécula de fluorapatita: os átomos vermelhos representam oxigênio, os verdes o flúor, o dourado o fósforo e os azuis claro o cálcio.

Usando o programa DL_POLY 4, criado por I.T.Todorov e W. Smith do laboratório Daresbury que usa, para fins de simulação, o método de Dinâmica Molecular é possível gerar os nanocristais de fluorapatita e clorapatita. O programa contém um manual descrevendo o que é necessário para criação da rede que são basicamente três inputs. O CONFIG, o CONTROL e o FIELD. Basicamente eles ditam as posições atômicas (CONFIG), o tipo de ensemble e o alcance das interações (CONTROL), e o tipo de interação entre os átomos (FIELD). Feito isso gerasse o cristal de fluorapatita, com o cristal pronto se elabora um programa pra criar os *thermal spikes* que consiste em ir mudando a energia cinética de um conjunto de átomos ao redor de um cilindro definido com um raio de 6 μm simulando assim um traço de fissão.

Referências

- [1] http://pangea.stanford.edu/research/groups/structure/research.php?rg_id=33&rgpr_id=63
 [2] S. Guedes, J. C. Hadler, K. M. G. Oliveira, P. A. F. P. Moreira, P. J. Lunes, C. A. Tello, Rad.Meas. 41 (2006) 395.
 [3] W. D. Carlson, 1990 - American Mineralogist 75, 1120
 [4] J. A. L. Rabone, A. Carter, A. J. Hurford, N. H. de Leeuw, Phys. Chem. Minerals 35 (2008) 583.
 [5] R. W. G. Wyckoff, Crystal structures. Nova Iorque: J. Willey, 1965. 6 v.