



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA  
XXVIII SIC

paz no plural



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2016
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Estrutura e propriedades termodinâmicas das fases condensadas do sistema SixGe1-x via dinâmica molecular
<b>Autor</b>	CAROLINE DOS SANTOS SOARES
<b>Orientador</b>	GUSTAVO DE MEDEIROS AZEVEDO

## **Estrutura e propriedades termodinâmicas das fases condensadas do sistema $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ via dinâmica molecular**

Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Aluna: Caroline dos Santos Soares.

Orientador: Gustavo Azevedo.

Nanopartículas são reconhecidas por possuírem propriedades químicas e estruturais distintas do material massivo. O controle destas propriedades é um fator significativo para o desenvolvimento e aperfeiçoamento de materiais. Silício e germânio reagem entre si para formar a liga  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ . As nanopartículas desta liga, quando encapsuladas por um material dielétrico[1], podem ser utilizadas na fabricação de dispositivos optoeletrônicos devido as suas propriedades ópticas. O objetivo deste trabalho é estudar os processos de fusão e solidificação como função do tamanho das NPs da liga de  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ .

Dinâmica molecular é um método computacional utilizado para simular o comportamento de materiais quando estes estão sob certas condições termodinâmicas. Este método considera que os átomos são esferas massivas e que a força que atua sobre eles é função da distância interatômica [2], portanto, para determinar a posição dos átomos durante cada instante de tempo deve-se contabilizar as forças que atuam em cada átomo que constitui o material e integrar a equação de Newton. Com o conhecimento das posições dos átomos do material de estudo pode-se determinar as propriedades estáticas e dinâmicas do mesmo. Para descrever a força que age sobre os átomos, são utilizados potenciais interatômicos.

O potencial reaxFF (Reactive Force Field), desenvolvido por van Duin et al [3], é utilizado para descrever as interações entre as moléculas e os átomos na matéria condensada e em sistemas moleculares. Este potencial é parametrizado com dados obtidos por experimentos e por mecânica quântica. Diferente de potenciais empíricos, este tipo de potencial considera que a ordem de ligação é função da distância interatômica, portanto, ao calcular esta variável em cada iteração é possível prever a dissociação e a formação de ligações químicas[3]. Por causa disto, o reaxFF têm a capacidade de descrever os átomos interagentes em ambientes com coordenações distintas. Durante o crescimento de NPs de  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ , há formação e dissociação de ligações químicas, além disso, a amostra apresenta diferentes fases durante a formação das NPs.

A fase atual do projeto visa conferir a transferibilidade do potencial, que foi desenvolvido no trabalho de [4], através de simulações que determinam os valores de propriedades experimentalmente bem definidas como a energia coesiva e *bulk modulus* para as fases cristalinas do silício e do germânio por intermédio do programa LAMMPS. A nossa perspectiva futura é simular a liga  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  com diferentes concentrações de Ge para gerar um diagrama de fases e confrontar os dados obtidos com os resultados experimentais e teóricos.

[1] GASPERINI, Antônio Augusto Malfati. Estudo do processo de formação de nanopartículas de GeSi em matriz de sílica por técnicas de luz síncrotron. 2011. 215 f. Tese (Doutorado em Física) – UNICAMP.

[2] LEE, June Gunn. Computational Materials Science: An Introduction. CRC Press, 2011. p. 9-44.

[3] van Duin, A. C. T., Dasgupta, S., Lorant, F. & Goddard, III W. A. ReaxFF: a reactive force field for hydrocarbons. J. Phys. Chem. A 105, 9396–9409 (2001).

[4] Psofogiannakis, G. and van Duin, A. C. T., 2015. ReaxFF Simulations of Hydrogen Atom Bombardment of Si, Ge, and SiGe alloy surfaces. Surface Science 646, 253-260.