



## Estudo de Formação de Nanopartículas de GeSi Encapsuladas em Sílica por Dinâmica Molecular

Caroline dos Santos Soares, Gustavo M de Azevedo

Nanopartículas são pequenos aglomerados que contêm desde centenas até alguns milhares de átomos. Além de possuírem propriedades distintas do material massivo, o mecanismo de formação pode alterar as suas propriedades. Logo, um estudo a nível atômico dos estágios do processo de formação de NPs pode ampliar as aplicações científicas e tecnológicas das mesmas. Este projeto baseia-se na tese “Estudo do processo de formação de nanopartículas de GeSi em matriz de sílica por técnicas de luz síncrotron” para estudar a formação destas nanopartículas através do método de dinâmica molecular.

### Objetivo

O objetivo deste projeto é estudar, a nível atômico, a formação de nanopartículas de GeSi encapsuladas em uma matriz de Sílica através de simulações pelo método de Dinâmica Molecular. O trabalho citado realizou um estudo *in situ* durante tratamento térmico, e verificou a existência de fase líquida e sólida nas diferentes etapas. Sabendo disto, é necessário que a dinâmica molecular seja capaz de simular estas fases e as suas transições. A etapa atual do projeto visa encontrar o potencial que melhor descreve estas fases.

### Método

Dinâmica molecular é um método computacional clássico que utiliza um potencial de interação empírico para encontrar a força que cada átomo contido no material exerce sobre os seus vizinhos, assim, encontra-se as posições e velocidades de cada átomo em função do tempo através da terceira lei de Newton. Descrevendo as posições e velocidades de cada átomo podemos encontrar as propriedades do material, como energia e pressão exercida pelo mesmo.

Os potenciais empíricos Stilinger Weber e Tersoff foram escolhidos para realizar as simulações de germânio e silício. Ambos contêm termos de interação entre dois e três átomos e definem uma distância a partir da qual a interação entre átomos é desprezível. Estes potenciais possuem limitações, por isso, nesta fase do projeto estamos definindo qual o potencial deve-se utilizar para realizar uma análise completa da formação das NPs.

### Resultados

As simulações foram feitas com auxílio da plataforma LAMMPS, e a ferramenta de visualização OVITO foi utilizada para verificação. A energia coesiva das NPs de silício e de germânio foi calculada em diferentes fases cristalinas para conferir a capacidade dos potenciais em prever a fase sólida mais estável em condições ambiente.

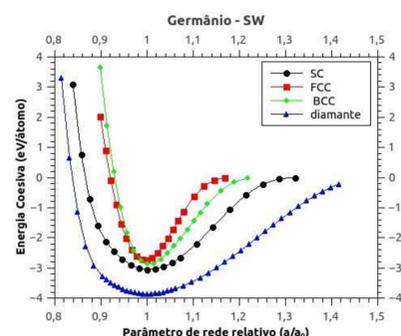


Fig.1: Energia coesiva do Ge simulada pelo SW.

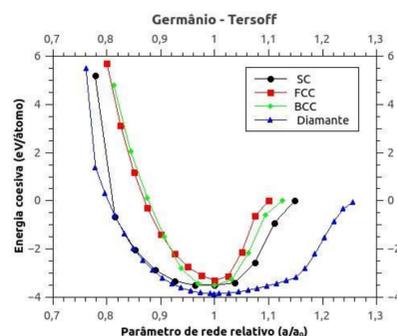


Fig.2: Energia coesiva do Ge simulada pelo Tersoff.

As figuras 1-2 apresentam os gráficos da energia coesiva, de um cristal de germânio, em função do parâmetro de rede relativo. A fig.1 representa o resultado da simulação realizada com o potencial SW e a fig. 2 representa o resultado obtido utilizando o potencial Tersoff.

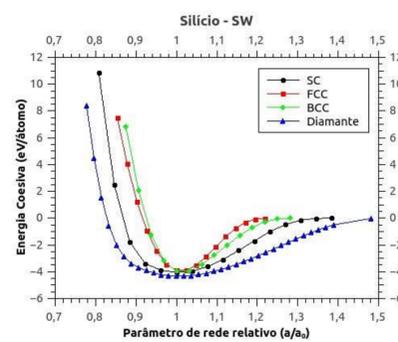


Fig.3: Energia coesiva do Si simulada pelo SW.

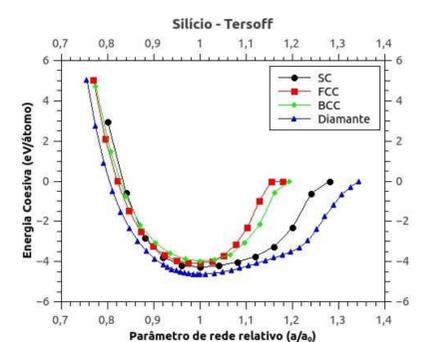


Fig.4: Energia coesiva do Si simulada pelo Tersoff.

Já as figuras 3-4 apresentam os gráficos da energia coesiva de um cristal de silício. Na fig. 3, a simulação foi realizada com o potencial SW e na fig. 4 foi utilizado o potencial Tersoff.

Nas simulações feitas pelos os dois potenciais, os mínimos da energia coesiva ocorrem na fase cristalina diamante, tanto para o silício quanto para o germânio.

Na temperatura de transição de fase, as duas fases coexistem em equilíbrio, porque possuem a mesma energia de Gibbs. A fusão do silício com o potencial Stilinger Weber foi simulada, criando um paralelepípedo, com 4000 átomos num ensemble microcanônico, que inicialmente possuía uma região sólida e outra região na qual ocorre a nucleação da fase líquida. Após simular o equilíbrio termodinâmico para as duas regiões separadamente, as duas são colocadas em contato. Observou-se que na temperatura 1830K as duas fases coexistem em equilíbrio. As Figuras 5-7 representam a evolução do processo.

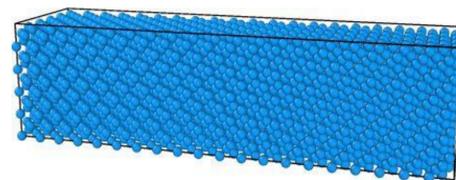


Fig. 5: Paralelepípedo cristalino. Átomos em azul estão na: fase diamante.

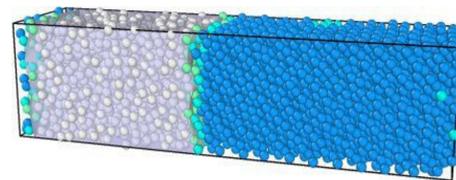


Fig.6: Ocorre nucleação da fase líquida. Átomos em azul estão na fase diamante e átomos em branco estão na fase líquida.

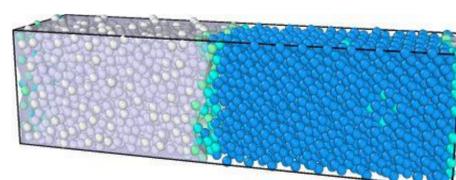


Fig7: Depois do equilíbrio termodinâmico, as duas fases entram em contato. A coexistência das fases indica temperatura de fusão.