



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2015
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Estudo de Formação de Nanopartículas de GeSi Encapsuladas em Sílica por Dinâmica Molecular
<b>Autor</b>	CAROLINE DOS SANTOS SOARES
<b>Orientador</b>	GUSTAVO DE MEDEIROS AZEVEDO

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Aluna: Caroline dos Santos Soares

Orientador: Gustavo de Medeiros Azevedo

Título: Estudo da formação de nanopartículas de GeSi encapsuladas em Sílica por Dinâmica Molecular

Nanopartículas podem ser formadas por diversos processos, apresentando propriedades químicas e estruturais significativamente diversas do material equivalente massivo [1]. Para analisar as suas propriedades, durante estes processos, muitas técnicas de análise de materiais são necessárias [1], fazendo disto uma tarefa complexa. Neste projeto, estudaremos como ocorre a formação e as propriedades estruturais de nanopartículas de GeSi encapsuladas em sílica através de simulações pelo método de Dinâmica Molecular.

Dinâmica Molecular consiste em resolver a equação de Newton para cada átomo em um sistema com  $N$  átomos [2]. A força resultante sobre um átomo é a soma das forças de interação com todos os átomos vizinhos. Supõe-se que a força entre átomos seja função da distância interatômica [3], além disso, ela é dada pelo gradiente da energia potencial. Em seguida, integra-se a equação de movimento em intervalos de tempo infinitesimais para encontrar a posição de cada partícula em função do tempo. Assim, é possível mensurar outras grandezas físicas [4] que descrevem o sistema, como a energia de coesão e pressão. A simulação da matéria condensada exige o conhecimento do potencial interatômico que descreve as interações entre os átomos. Uma abordagem comum é recorrer a potenciais empíricos, tais como os potenciais Lenard Jones, Stillinger-Weber e Tersoff [4].

A análise da formação de nanopartículas de GeSi encapsuladas em sílica requer a simulação de diferentes fases dos materiais (sólido cristalino, sólido amorfo e líquido), além da interação entre a nanopartícula e a matriz de sílica. Sabe-se, no entanto, que potenciais empíricos não são capazes de descrever (com a mesma parametrização) todos os ambientes de coordenação necessários para simular a formação de uma nanopartícula [4]. Uma abordagem possível é a realização de cálculos de dinâmica molecular ab-initio. No entanto, o custo computacional deste tipo de simulação é elevado. Recentemente, foram desenvolvidos potenciais do tipo ReaXX, que têm a capacidade de descrever diferentes ambientes de coordenação dos átomos interagentes. Tais potenciais têm sido utilizados com sucesso na simulação de reações químicas orgânicas e inorgânicas [5].

Neste projeto, estamos testando a utilização dos potenciais tipo REAXX na simulação de diversas fases de compostos GeSi, com o auxílio da ferramenta LAMMPS. Resultados referentes ao diagrama de fases do material obtidos por Dinâmica Molecular Clássica serão confrontados com resultados experimentais e resultados obtidos a partir de cálculos ab-initio.

#### Referências:

- [1] GASPERINI, Antônio A. M. Estudo do processo de formação de nanopartículas de GeSi em matriz de sílica por técnicas de luz síncrotron. 215 f.. (Doutorado em Física) – UNICAMP.
- [2] LEE, June G.. Computational Materials Science: An Introduction. CRC Press, 2011. p. 9-44.
- [3] RAPAPORT, Dennis C.. The Art of Molecular Dynamics Simulation. 2ª edição. Cambridge University Press, 2004. p. 1-43.
- [4] GILLESPIE, Brian Andrew. Bond Order Potentials for Group IV Semiconductors. 2009. 183 f.. Dissertação (Doutorado em Engenharia Física) – University of Virginia.
- [5] Adri C. T. Van Duin et al, J. Phys. Chem. A. 2003, 107 (19), pp 3803-3811