

Introdução

Neste trabalho, investigamos as estruturas condensadas do Si, do Ge e da liga $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ através de dinâmica molecular. O potencial de interação reaxFF [1] descreve as interações entre os átomos do sistema. As simulações foram feitas por intermédio do programa LAMMPS.

Objetivo

O objetivo deste trabalho é estudar os processos de fusão e solidificação como função do tamanho das NPs da liga de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$. A fase atual do projeto visa conferir a transferibilidade do potencial reaxFF [1] 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, do germânio e da liga $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$.

Experimental

O parâmetro de rede, a energia coesiva e o *bulk modulus* foram determinados para o Si e Ge nas suas estruturas cristalinas cúbicas (SC, BCC, FCC e DC). Para a fase diamante do Si, as constantes cristalinas C_{11} e C_{12} foram calculadas.

Resultados e Discussões

Em condições ambientes, os materiais Si, Ge e $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ permanecem na fase sólida na estrutura cristalina diamante. As figuras 1-3 apresentam os gráficos da energia de ligação em função do parâmetro de rede do Si, Ge e $\text{Si}_{0,17}\text{Ge}_{0,83}$, respectivamente, para as fases cristalinas BCC, FCC, SC e diamante. A altura do poço de energia, para os três materiais, é maior na estrutura diamante, logo resultados obtidos por dinâmica molecular estão de acordo com os resultados experimentais.

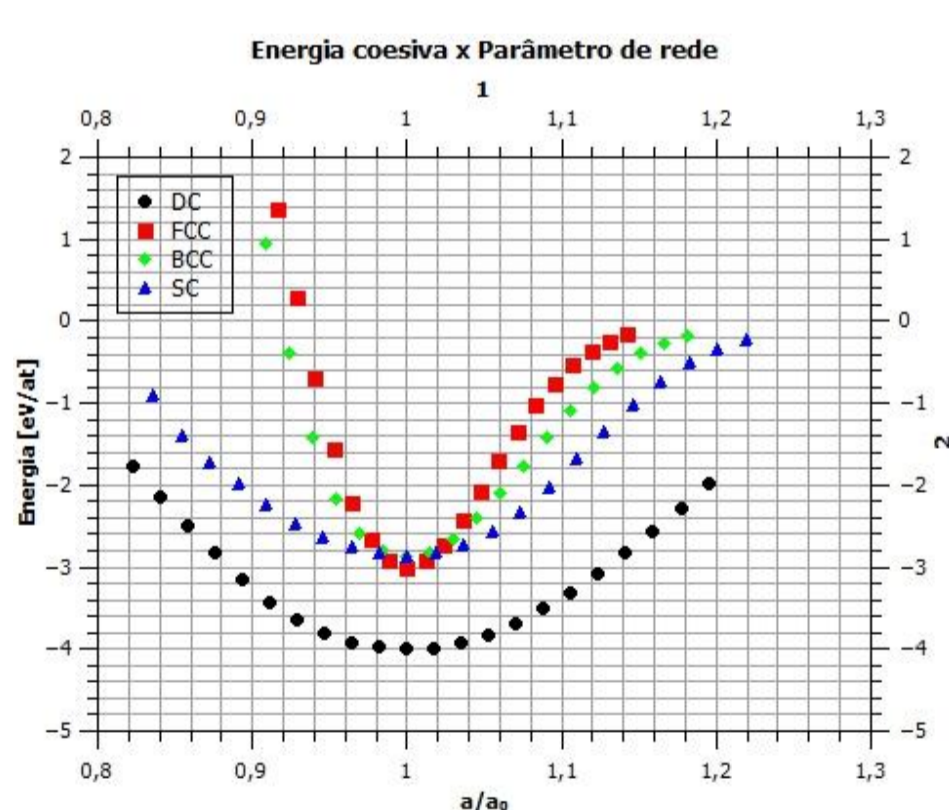


Fig. 1 Energia coesiva do Si.

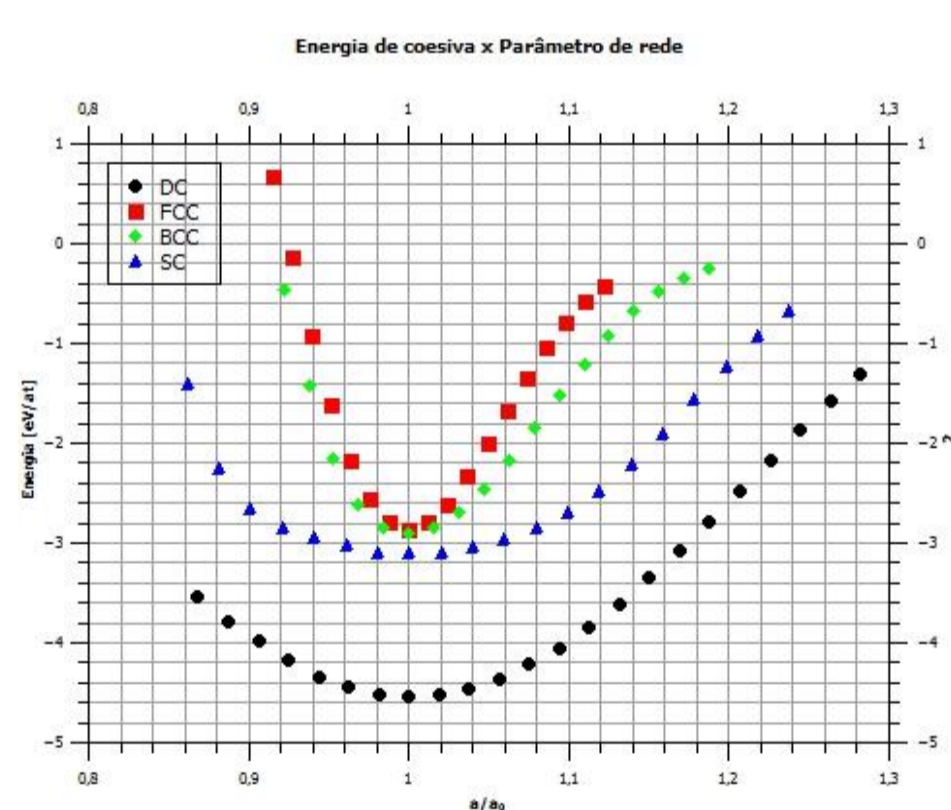
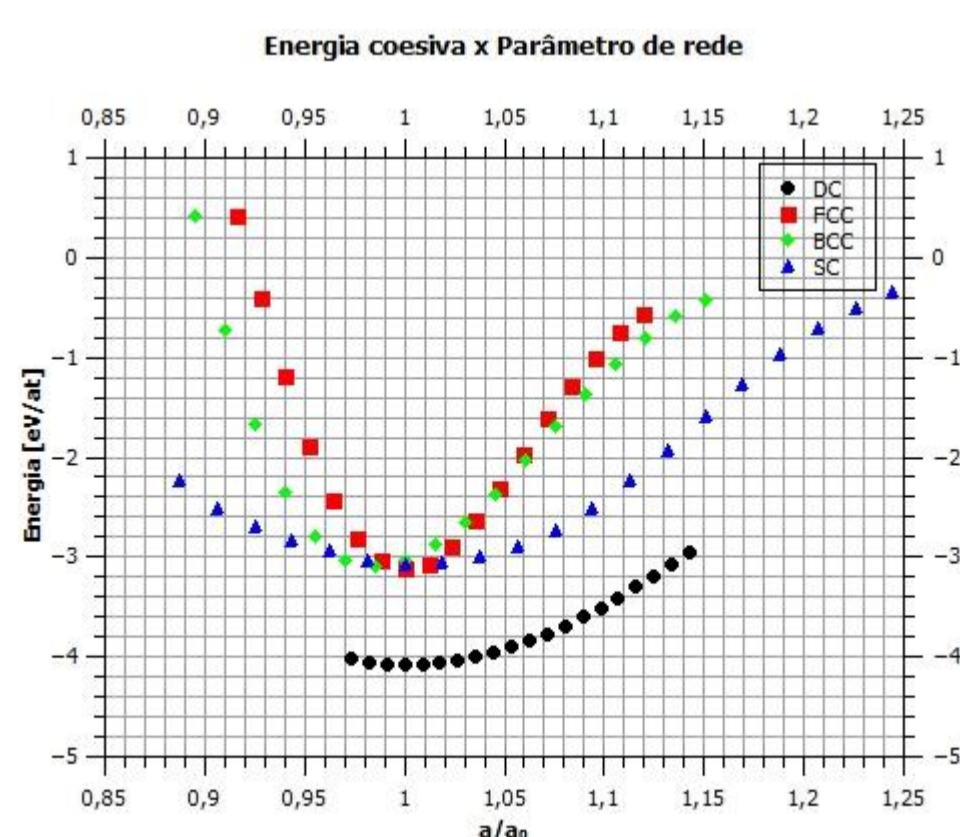


Fig. 2 Energia coesiva do Ge.


 Fig. 1 Energia coesiva da liga $\text{Si}_{0,17}\text{Ge}_{0,83}$.

As tabelas 1-2 apresentam as energias coesivas e os parâmetros de rede do Si e do Ge obtidas por dinâmica molecular e por DFT. Os dados DFT foram obtidos na literatura.. A tabela 3 apresenta as energias coesivas e os parâmetros de rede da liga.

Tabela 1: Energia coesiva e parâmetro de rede do Si.

ReaxFF	Parâmetro de rede (Å)	Energia Coesiva (eV/at)	DFT	Parâmetro de rede (Å)	Energia Coesiva (eV/at)
DC	5,31880	-4,535617	DC	5,43	-4,63
FCC	4,09932	-2,861711	FCC	3,82	-2,17
BCC	3,19925	-2,903780	BCC	3,05	-2,09
SC	2,527123	-3,10571	SC	2,56	-1,35

Tabela 2: Energia coesiva e parâmetro de rede do Ge.

ReaxFF	Parâmetro de rede (Å)	Energia Coesiva (eV/at)	DFT	Parâmetro de rede (Å)	Energia Coesiva (eV/at)
DC	5,652856	-4,002898	DC	5,649	-3,82
FCC	4,204971	-3,000952	FCC	4,180	-3,48
BCC	3,302432	-2,872677	BCC	3,304	-3,47
SC	2,742282	-2,859952	SC	2,655	-3,58

 Tabela 3: Energia coesiva e parâmetro de rede da liga $\text{Si}_{0,17}\text{Ge}_{0,83}$.

ReaxFF	Parâmetro de rede (Å)	Energia Coesiva (eV/at)
DC	5,6018	-4,07776
FCC	4,1827	-3,77052
BCC	3,3240	-3,75923
SC	2,6610	-3,06905

Nas tabelas 4-5, estão contidos os valores do *bulk modulus* do Si e Ge obtidos a partir da definição deste (eq. 1) através dos dados obtidos por DM e DFT. A tabela 6 contém os valores do *bulk modulus* da liga $\text{Si}_{0,17}\text{Ge}_{0,83}$.

Tabela 4: Bulk módulos do Si.

Si	B por ReaxFF (GPa)	B por DFT (GPa)
DC	110,21	105,4
FCC	1000,05	93,54
BCC	529,36	111,3
SC	90,71	105,6

Tabela 5: Bulk módulos do Ge.

Ge	B por ReaxFF (GPa)	B por DFT (GPa)
DC	108,01	60,72
FCC	1096,42	63,49
BCC	535,73	63,59
SC	151,42	67,38

 Tabela 4: Bulk módulos da liga SiGe .

$\text{Si}_{0,17}\text{Ge}_{0,83}$	DC	FCC	BCC	SC
Bulk módulos (GPa)	107,61	859,71	582,69	121,22

As constantes elásticas C_{11} e C_{12} do Si determinadas por dinâmica molecular são, respectivamente, 159,10 GPa e 70,95 GPa.

[4] Psogiannakis, 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.