

Estudo de propriedades estruturais e mecânicas de cristais de silício dopados com carbono via simulações atomísticas

L. T. Silva^a e F. Sato^a

a) Universidade Federal de Juiz de Fora, Departamento de Física.

Resumo

Âodos de silício para baterias de Íon Lítio apresentam uma eficiência energética elevada e portanto se mostram possíveis substitutos dos atuais ânodos de grafite. Porém, sua implementação se torna uma tarefa complicada devido a fragilidade mecânica dos cristais de silício puro em contato com íons de lítio, onde estudos recentes mostram um grande aumento no volume do cristal na presença dos íons em seu interior. Portanto, em busca de aprimorar a resistência estrutural do silício, foi proposto em um estudo recente o uso de dopagem substitucional sobre o cristal de silício (Si), utilizando átomos de carbono (C), nitrogênio (N), alumínio (Al), boro (B) e fosforo (P), onde, nesse mesmo estudo, a dopagem com átomos de carbono e nitrogênio foram as que se mostraram mais promissoras. Nosso trabalho tem como objetivo ampliar o estudo sobre os cristais de silício com dopantes substitucionais de carbono, utilizando uma metodologia que nos permita incluir um número maior de partículas e verificar efeitos de superfície. Para efeito de comparação e validação do método, calculamos os dados de *bulk modulus* e energia de coesão para os cristais de silício puro e dopados com carbono com o programa DFTB+. Como resultado deste trabalho calculamos o *bulk modulus* e energia de coesão para outras células unitárias de silício puro e dopadas com carbono e também o módulo de Young de compressão para as estruturas com superfícies [100], [110] e [111].

e-mail: L. T. Silva –
lorrantesch@ice.ufjf.br