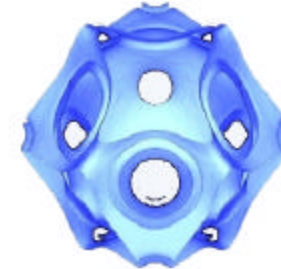




Núcleo Milenio



FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

Propiedades estructurales del GeO_2 en estado líquido

G. Gutiérrez

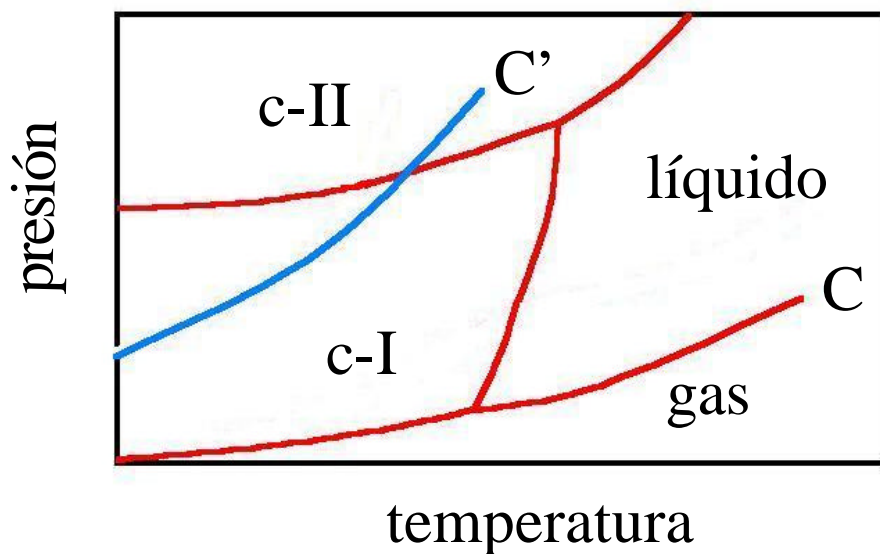
Departamento de Física, Universidad de Santiago de Chile

J. Rogan

Departamento de Física, Facultad de Ciencias,
Universidad de Chile

Motivaciones

Transiciones de fase en líquidos y amorfos: *poli-amorfismo*



Observado , entre otros en: $H_2O!!$
 SiO_2 , GeO_2 , P,
 $Al_2O_3-Y_2O_3$

- **Sistema GeO_2** (de "interés geológico y en cerámica") presenta cambio de coordinación tetraédrica a octaédrica bajo presión. En SiO_2 se ha estudiado. ¿Qué pasa con germania?



Germania es un material semiconductor análogo químico de la silica, pero más fácil de tratar en los experimentos a alta presión

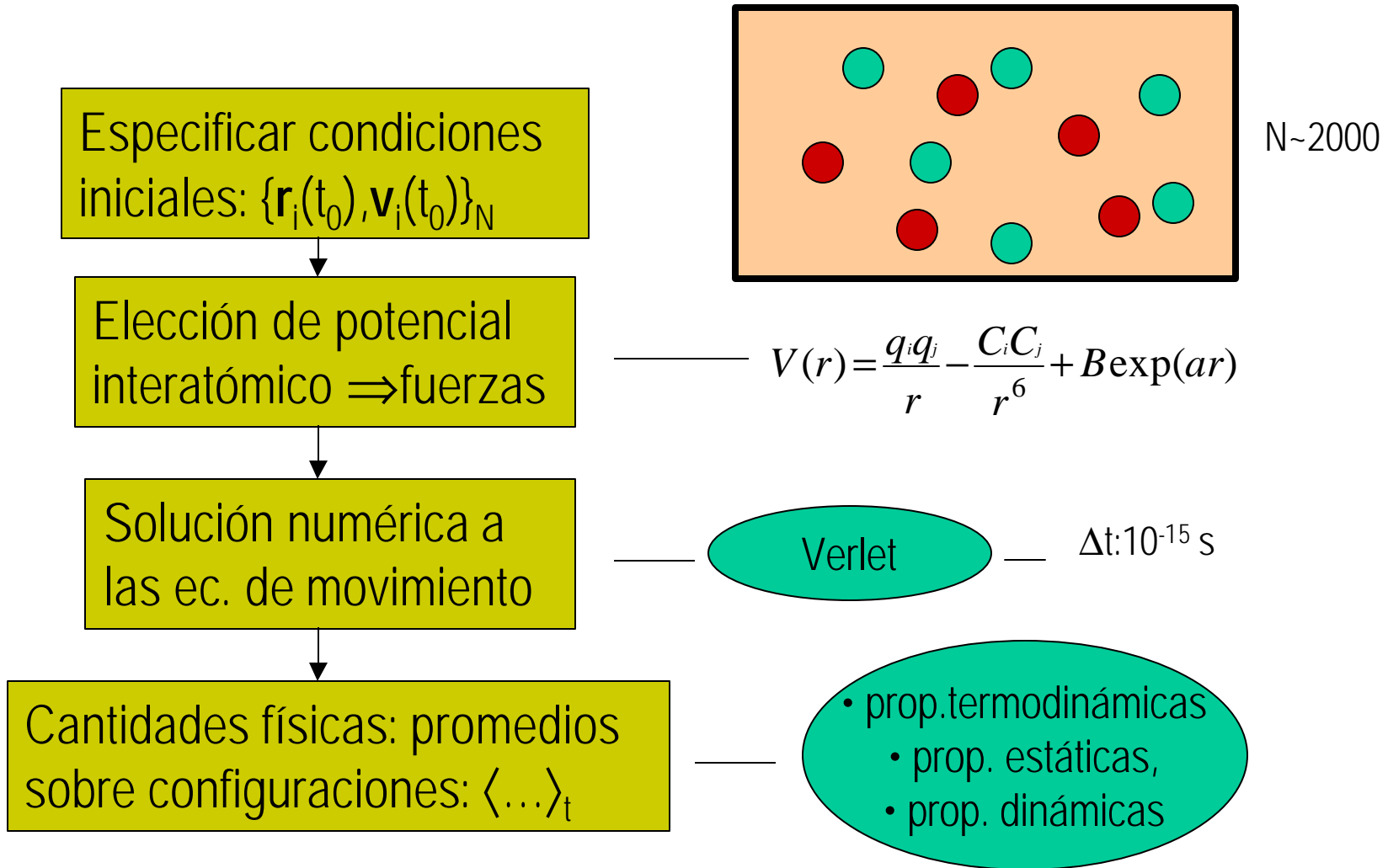
Transiciones de fase estructurales:

silica → cuarzo, coesita (2GPa), stishovita (8 GPa)
germania → cuarzo, rutilo (hasta 1300 K)

Algunas propiedades del germania

Phase	Density g/cm ³	Al Coordination Number	Bond length Al-O (A)	Bulk Modulus GPa
cuarzo	4.28	4(100%)	1.737	39.2
Cuarzo SiO ₂	2.65	4	1.6	37
rutilo	6.25	6(100%)	1.871	258
stishovite	4.29	6	1.8	
amorfo	3.7	4 (80-90%)	1.73	30

Dinámica Molecular



Procedimiento

Método computacional:

DM clásica:

- (192 Ge+ 384 O), (NEV), $\Delta t=1\text{fs}$, 27 densidades de 3.8 a 6.5 g/cm³

- potencial de pares tipo Buckingham:

$$V(r)=q_i q_j / r + A_{ij} / r^6 + B_{ij} \exp(-C_{ij} r)$$

- *Dos parametrizaciones diferentes: Matsui y Oeffner.*

- se parte de estructura cristalina, se funde a 5000 K y luego se baja a 3000 K y 1500K. Se caracteriza el líquido . En total ~150ps.

Diagrama de fases P-V, T=3000 K

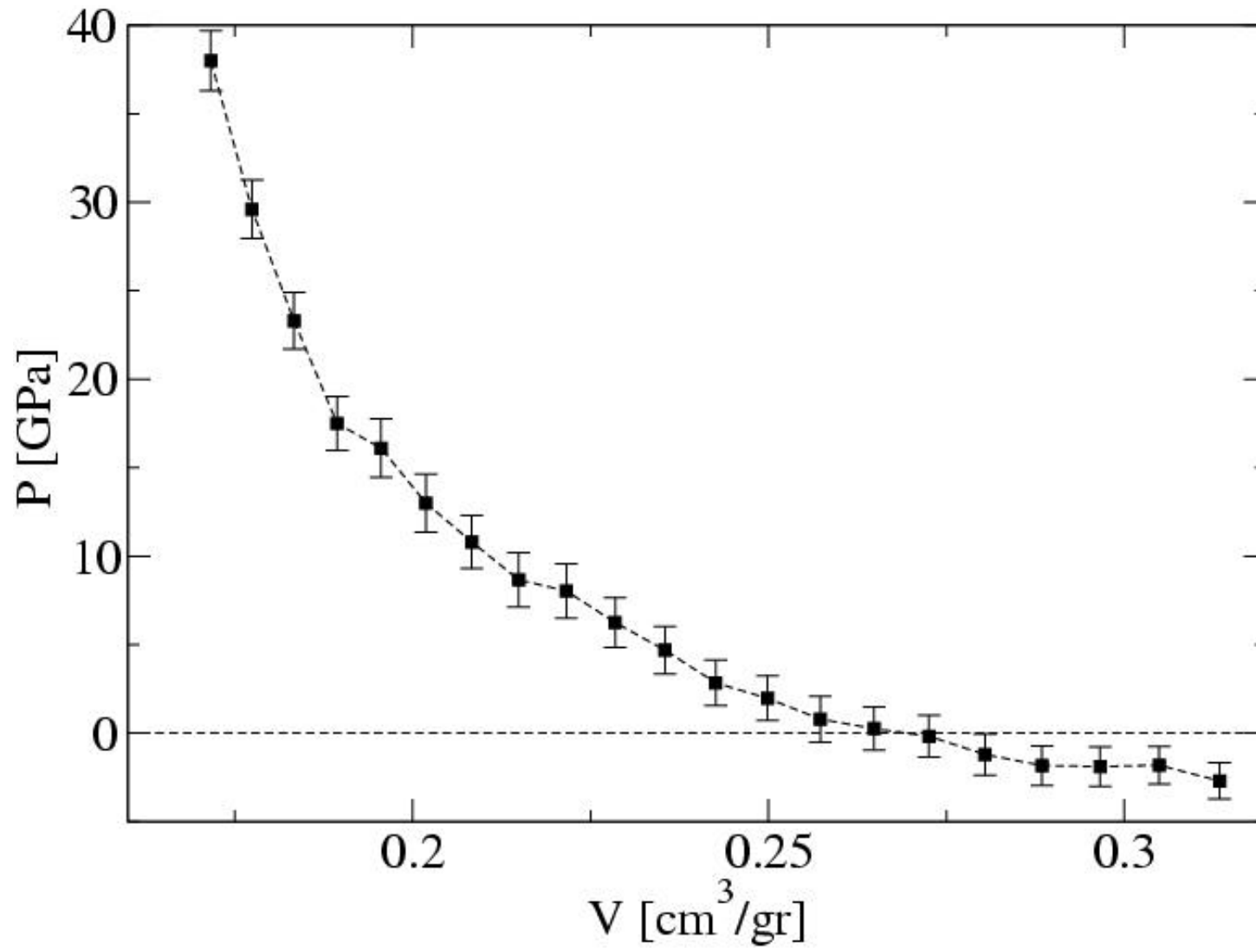
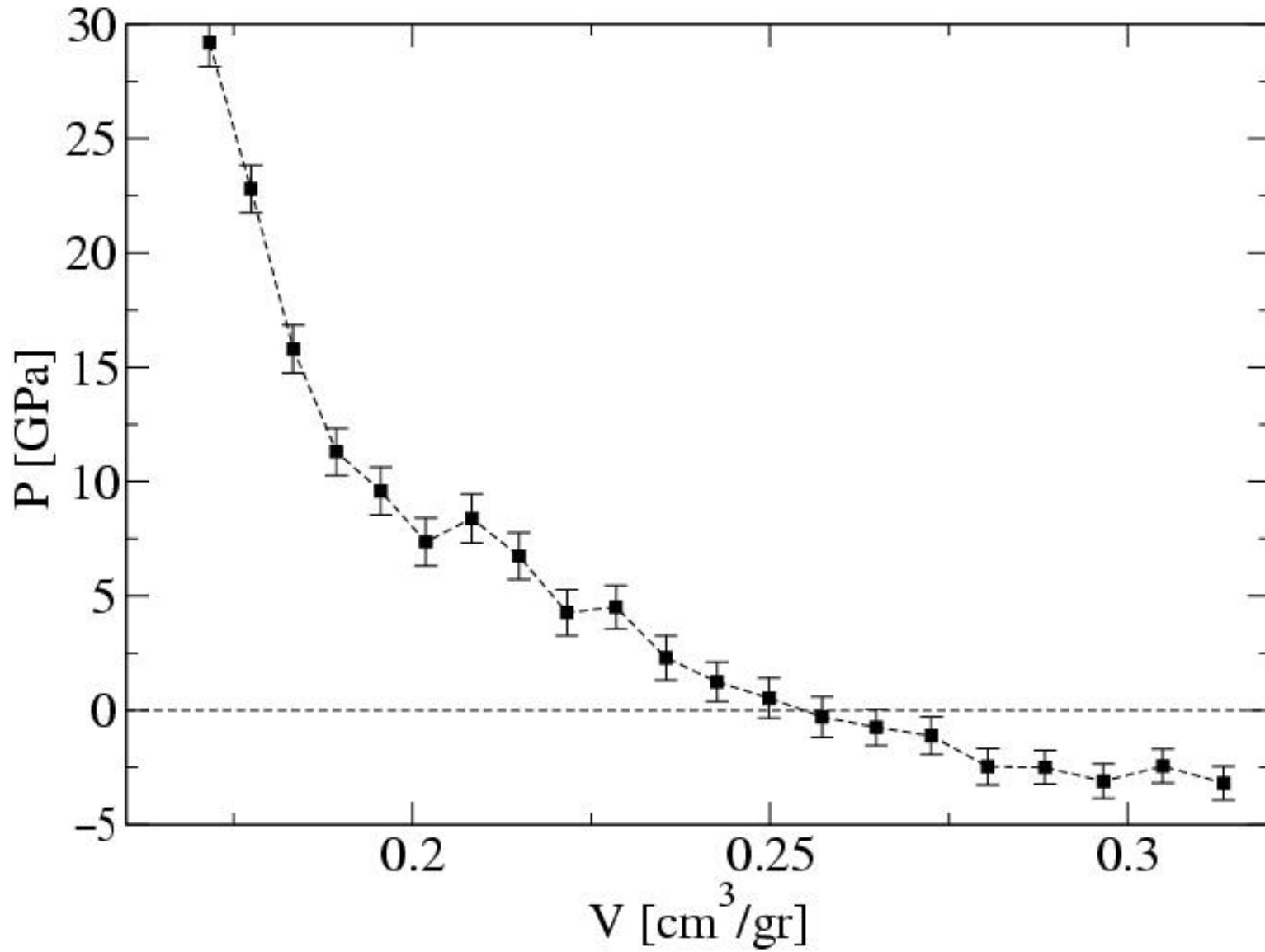
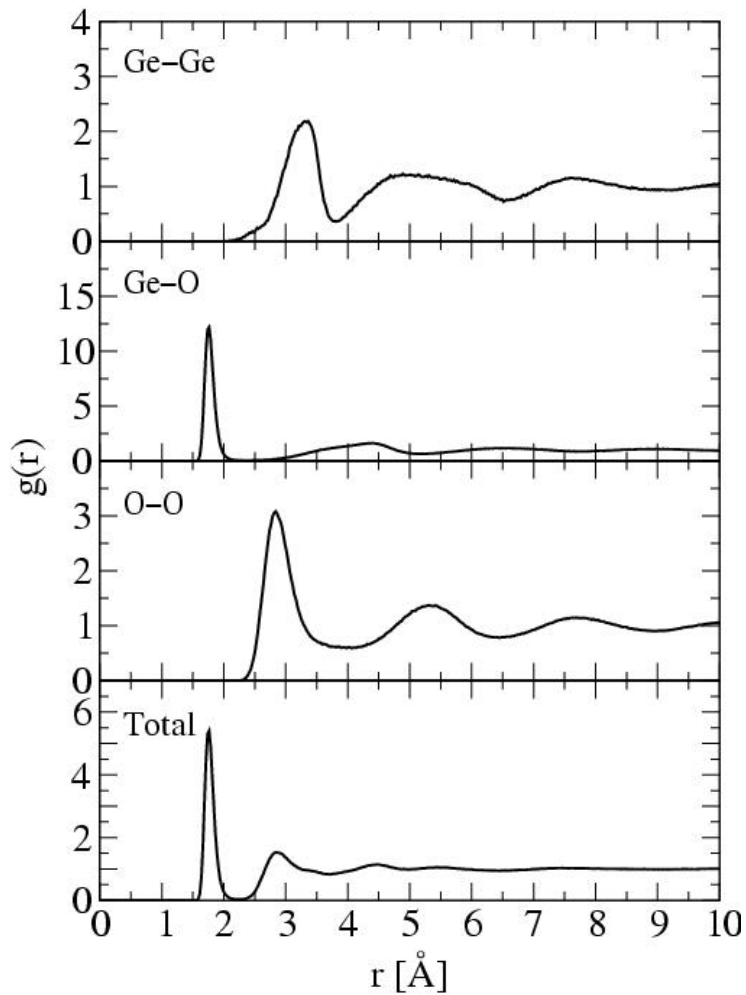


Diagrama de fases P-V, T=1500 K

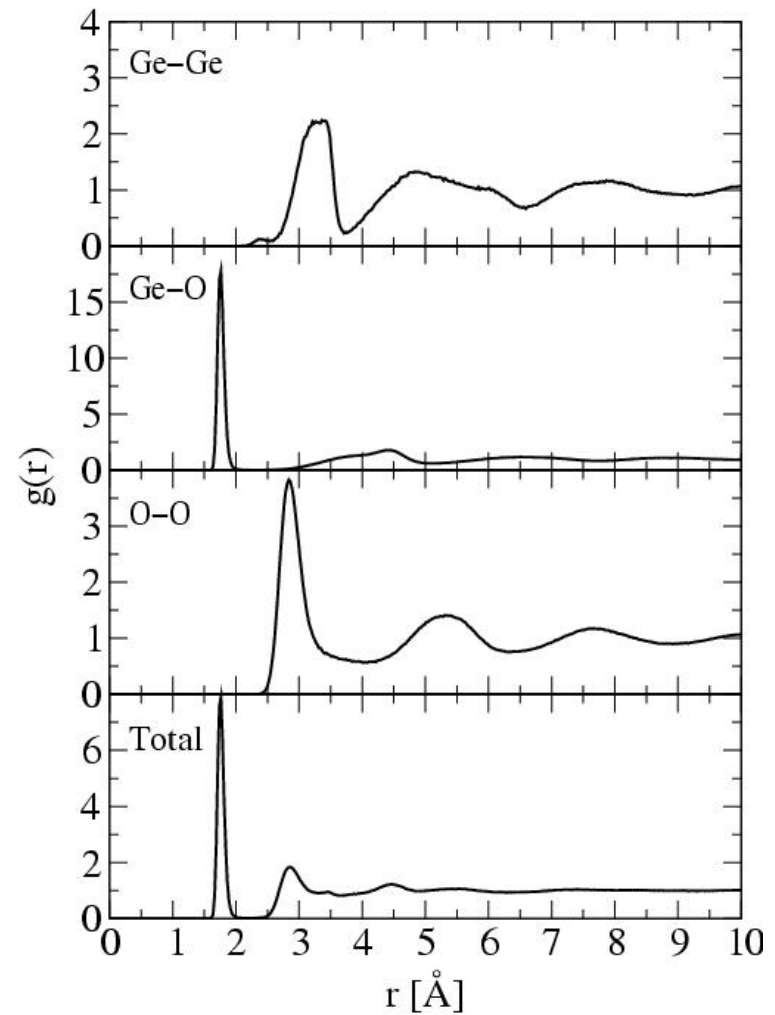


Función de distribución de pares $g_{ab}(r)$

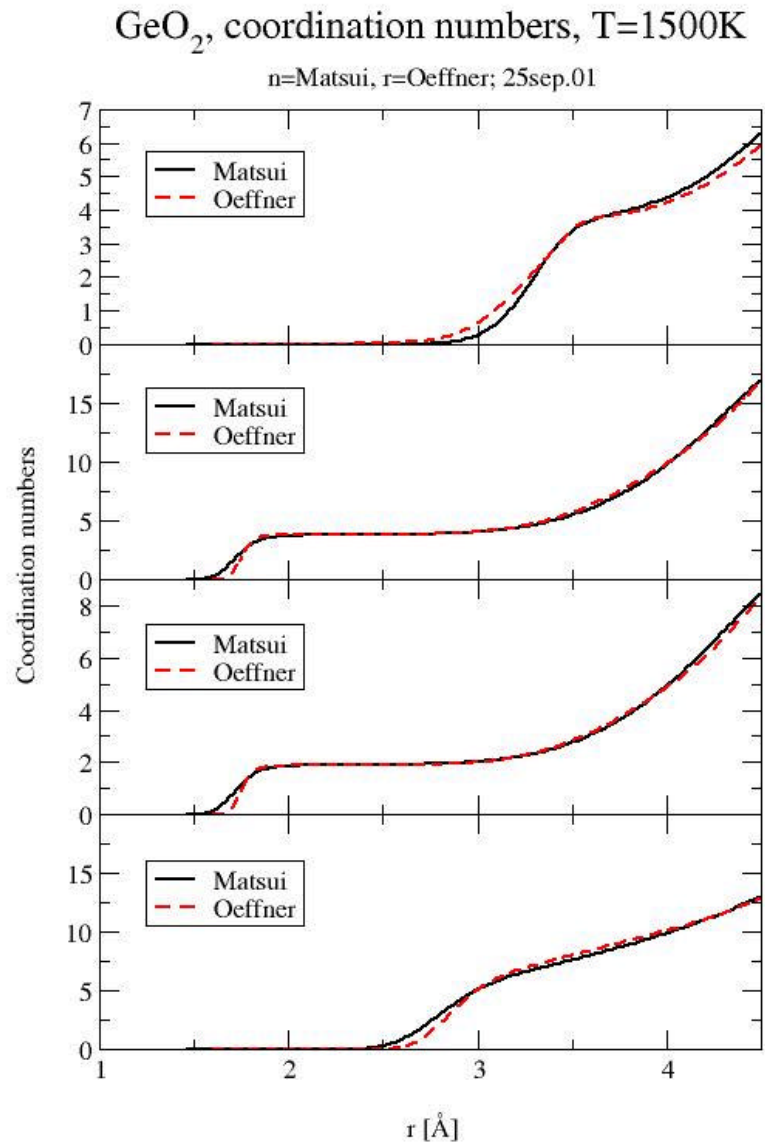
T=3000 K



T=1500 K

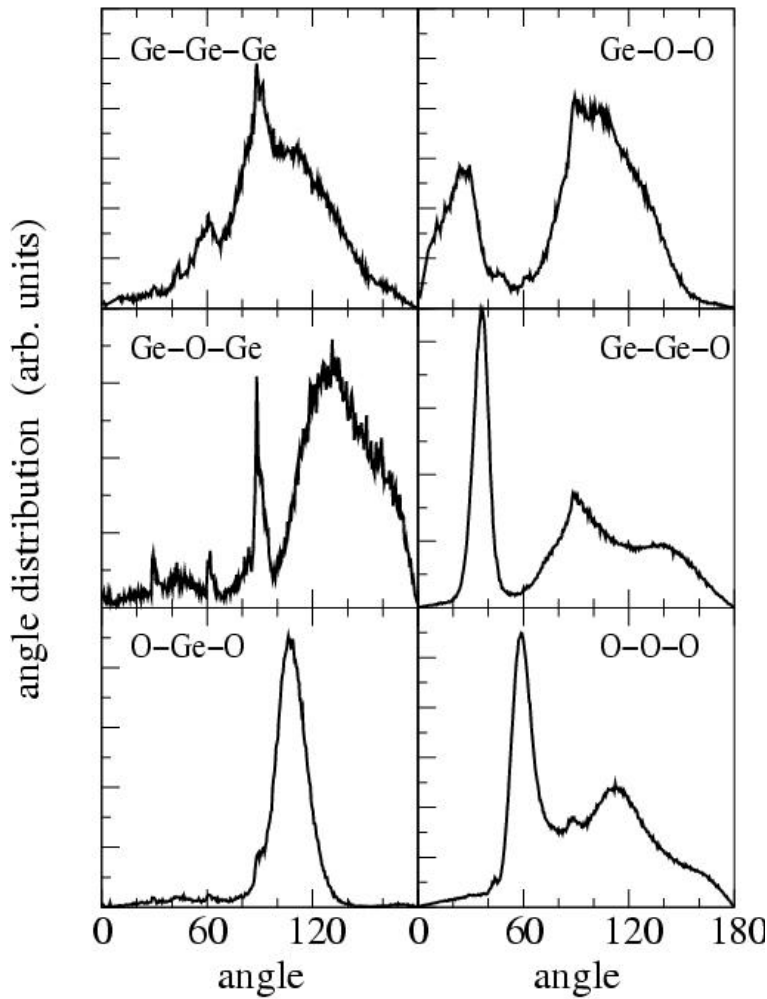


Número de coordinación

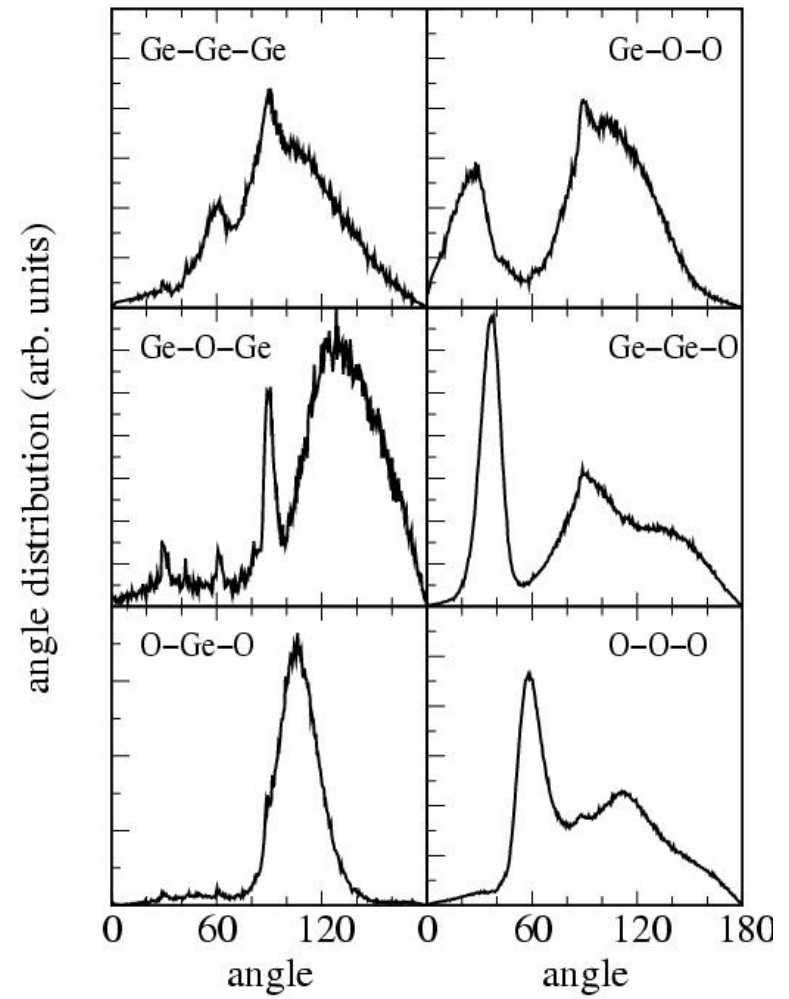


GeO₂: distribución de ángulos

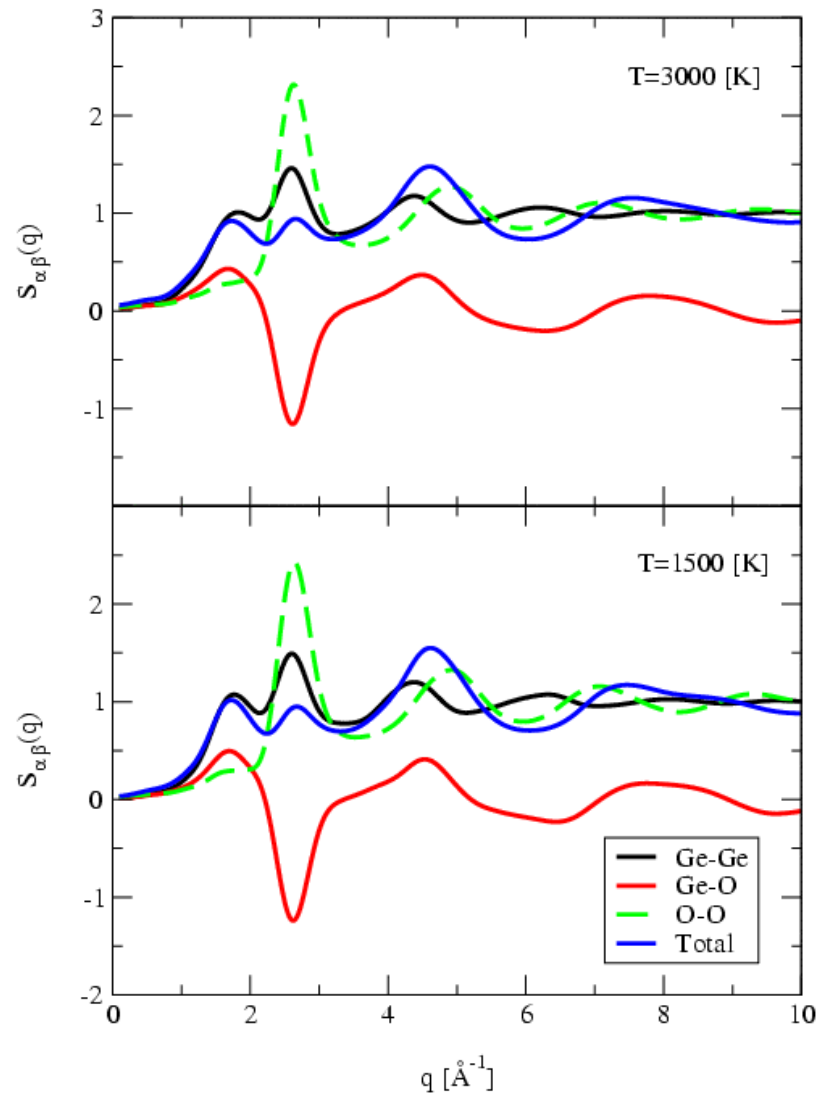
T=3000 K



T=1500 K

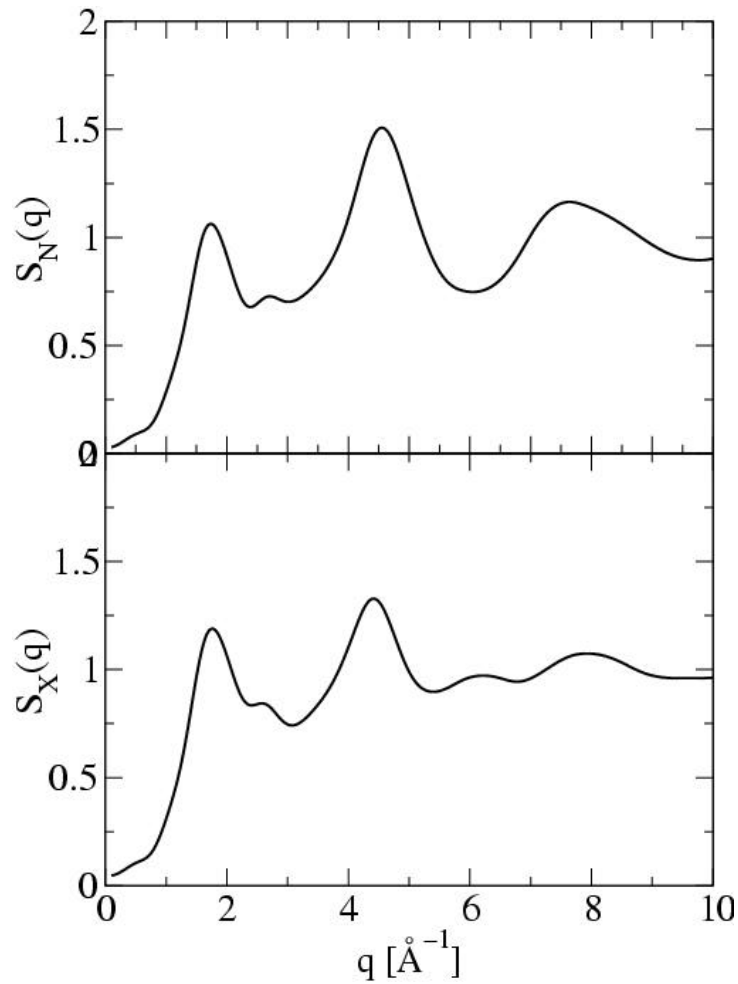


Factor de estructura estático parcial

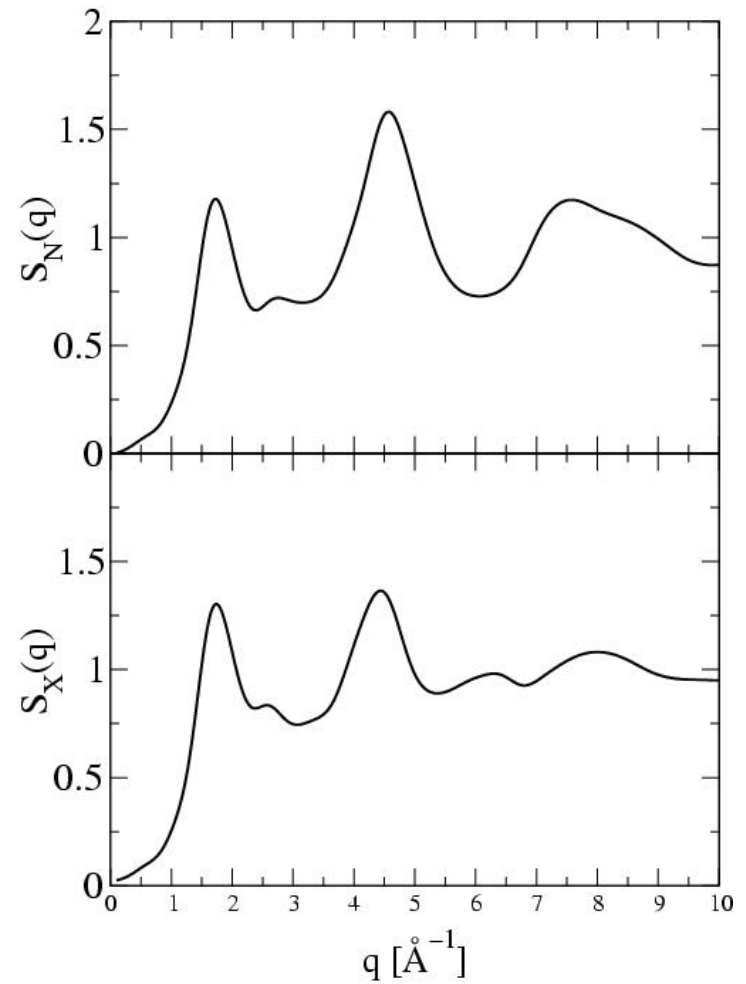


GeO₂: factor de estructura estático

T=3000 K



T=1500 K



Estructura

Densidad: 3.65 gr/cm³

Longitud de enlaces: Ge-O 1.7 Å
O-O 2.6 Å
Ge-Ge 3.3 Å

Número de coordinación Ge-O: 4, O-Ge: 2
O-O: 6
Ge-Ge: 4

Angulos: O-Ge-O = 109°
Ge-O-Ge = 130°

Comentarios finales

- Germania líquido presenta una transformación fase estructural entre los 4-8 Gpa., pasando de un orden de corto alcance tetraédrico a uno octaédrico.
- A presión ambiente está formado de tetraedros GeO_4 levemente distorsionado
- En general presenta mayor grado de correlación que la silica.