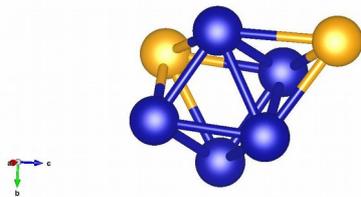


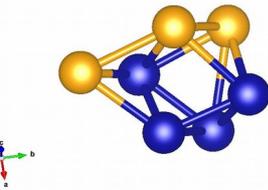
Ramon Nunes Krüger e Gerardo Martínez
Instituto de Física, UFRGS-Porto Alegre, RS, Brasil

Clusters bimetalícos

A configuração geométrica dos aglomerados atômicos carrega informações magnéticas relevantes para o sistema macroscópico. Para o entendimento de estruturas metaestáveis, utilizaram-se dados sobre as condições de menor energia do sistema (previamente calculados com o formalismo do DFT). Em particular, este trabalho se preocupa com a modelagem geométrica dos clusters bimetalícos da série com 7 átomos de Cu-Co. Por exemplo:

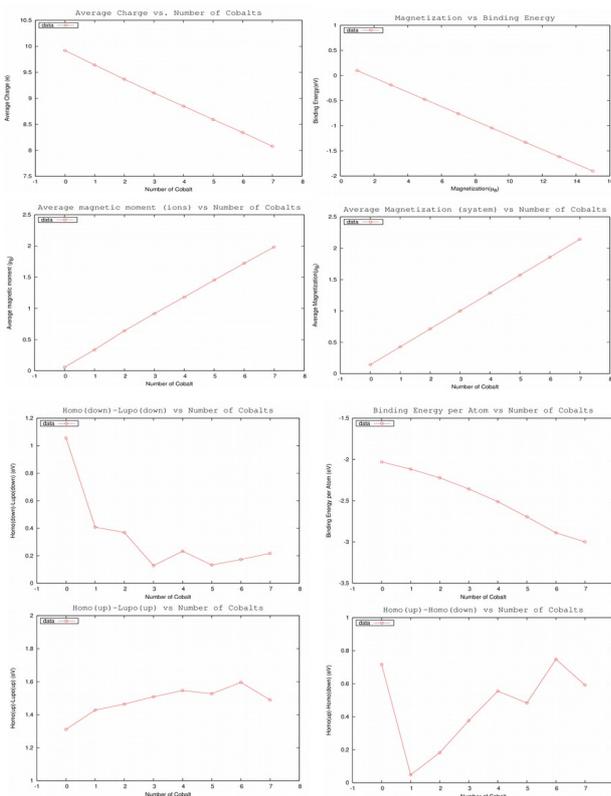


Co5Cu2



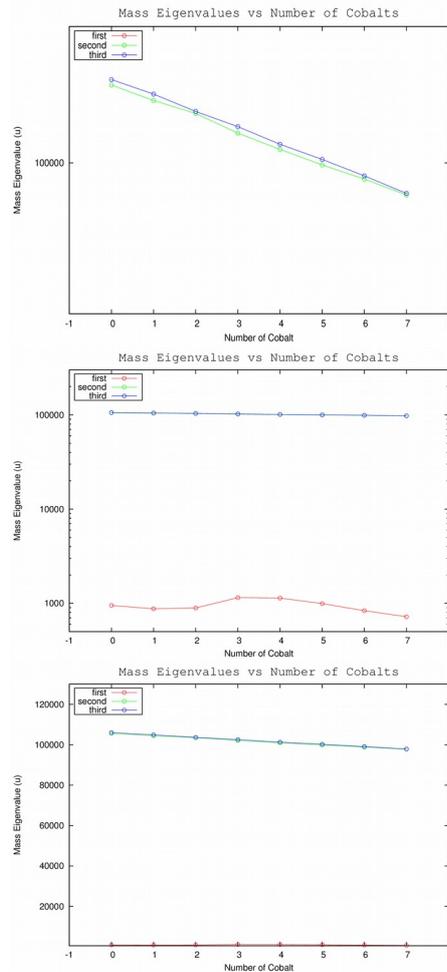
Co4Cu3

Estudos mostram uma mudança significativa da evolução magnética para sistemas com mais de 6 átomos, acredita-se que isso se deva ao fato do sistema passar de características bidimensionais para tridimensionais [2,3], o que altera a distribuição eletrônica e, portanto, a magnetização.



Configuração Geométrica

Para uma caracterização geométrica eficiente estudam-se clusters de Cu(n)Co(7-n), (n=0-7), procurando encontrar os autovalores dos tensores de inercia [1] do sistema em busca de um bom parâmetro físico que descreva com clareza o tipo de geometria desenvolvida com os diferentes arranjos de átomos. A evolução geométrica a partir dos autovalores são descritos nos gráficos abaixo:



Conclusões

Verifica-se a presença de autovalores distintos entre si, o que revela uma geometria não esférica, diferente do que a modelagem atual supõe. A partir desses dados faz-se necessário um estudo mais detalhado dos padrões geométricos assumidos pelas estruturas atômicas e suas influências em parâmetros magnéticos.

Referências

[1] Goldstein, Herbert. Classical Mechanics (1977).
 [2] Pérez, M; Muñoz, F; Mejía-López, J; Martínez, G. J Nanopart Res. 14 (2012) 933.
 [3] Martínez, G; Tangarife, E; Pérez, M; Mejía-López, J. J. Phys.: Condens. Matter 25 (2013) 216003.