



<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 da estrutura geométrica de aglomerados interagentes compostos de Cu-Co
<b>Autor</b>	RAMON NUNES KRÜGER
<b>Orientador</b>	GERARDO GUIDO MARTINEZ PINO

## Estudo da estrutura geométrica de aglomerados interagentes compostos de Cu-Co

Autor: Ramon Nunes Krüger

Orientador: Gerardo Guido Martínez Pino

Instituição: Instituto de Física da UFRGS

O estudo da configuração geométrica de aglomerados atômicos bimetálicos de Co-Cu é o tema da nossa pesquisa, em particular, o método de caracterização estrutural por meio dos autovalores do tensor de inércia. A distribuição geométrica que um conjunto finito de átomos pode atingir no seu estado de mais baixa energia é uma questão aberta na área da nanociência em sistemas magnéticos. O número de descritores geométricos existentes na literatura é imensa e cada um tem suas vantagens e desvantagens. A importância de obter um bom descriptor geométrico é fundamentada pelo fato que todas as propriedades físicas que um aglomerado tem dependem das posições dos átomos que o compõem, então procurar por um bom descriptor que possa descrever a geometria de aglomerados magnéticos é um dos principais objetivos da pesquisa atual.

Nosso objetivo neste trabalho consiste em estudar como os autovalores do tensor de inércia podem nos entregar informação sobre a configuração geométrica do estado de energia mínima de um conjunto de dados de simulações feitas anteriormente pelo grupo em aglomerados de Cu-Co, usando o formalismo do DFT (*Density Functional Theory*), além de caracterizar as vantagens descritoras que eles tem.