

# Estudo das estruturas binárias $\text{Na}_n\text{K}_m$ ( $n + m \leq 15$ ) através do potencial clássico (Gupta) como condição inicial para cálculos quânticos

Mateus Xavier Silva<sup>1</sup> (IC)\*, Jadson Cláudio Belchior<sup>1</sup> (PQ)

Departamento de Química, Instituto De Ciências Exatas, Universidade Federal De Minas Gerais, Campus-Pampulha, 31270-901 - Belo Horizonte, MG, Brasil. \*E-mail: mateusxavier@ufmg.br

Palavras Chave: cluster, liga metálica, algoritmo genético, potencial empírico.

## Introdução

Os algoritmos genéticos (GA's) têm sido empregados na determinação de mínimos, em princípio globais (MG) para superfícies de energia potencial (SEP) associadas às estruturas de clusters. O método padrão de GA's, utiliza operadores (OP) genéticos evolucionários como os de cruzamento, mutação e seleção natural aplicados a uma população inicial, visando à otimização do sistema, avaliando a "qualidade" dos indivíduos através de uma função denominada Fitness Function (FF).

Com o objetivo de refinar a análise desse tipo de sistema e aumentar a probabilidade de se encontrar o MG de energia na SEP (o que muitas vezes se mostra bastante difícil), o GA finalmente usa outros dois operadores, sendo eles o OP aniquilador e o OP história<sup>1</sup>.

O sistema binário estudado foi o  $\text{Na}_n\text{K}_m$  (com  $n + m \leq 15$ ), através do potencial empírico clássico Gupta<sup>2</sup>:

$$V_{\text{sistema}} = \sum_i^N (V^r(i) - V^m(i))$$

$$V^r(i) = \sum_j^N A \exp \left[ -p \left( \frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right] \quad V^m(i) = \left\{ \sum_j^N \zeta^2 \exp \left[ -2q \left( \frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right] \right\}^{1/2}$$

Onde  $V^r(i)$  é a interação repulsiva (em pares) entre os núcleos iônicos dos átomos metálicos e  $V^m(i)$  é a expressão, para muitos corpos, da energia de coesão devido aos elétrons de valência que mantêm os átomos metálicos conjuntamente.

## Resultados e Discussão

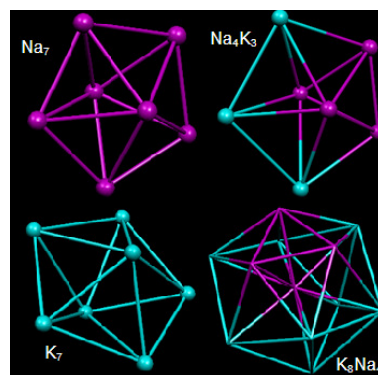
Os parâmetros empíricos associados ao potencial acima ( $r_0$ ,  $A$ ,  $\zeta$ ,  $p$  e  $q$ ) foram obtidos da literatura<sup>2</sup> e estão apresentados na Tabela 1 a seguir:

**Tabela 1.** Parâmetros empíricos do potencial Gupta para o sistema Na-K.

|              | $r_0$ (Å) | $A$ (eV) | $\zeta$ (eV) | $p$   | $q$  |
|--------------|-----------|----------|--------------|-------|------|
| <b>Na-Na</b> | 3.6989    | 0.01596  | 0.2911       | 10.13 | 1.30 |
| <b>K-K</b>   | 4.3673    | 0.02054  | 0.2626       | 10.58 | 1.34 |
| <b>Na-K</b>  | 4.0331    | 0.01825  | 0.2769       | 10.36 | 1.32 |

\*Os valores dos parâmetros para Na-K foram obtidos fazendo-se a média aritmética dos valores obtidos da literatura para as interações homoatômicas<sup>3</sup> (Na-Na e K-K).

As estruturas mais estáveis e suas energias foram determinadas através do GA, já descrito aqui, estando tais energias em alta concordância com dados obtidos na literatura para clusters de Na e K respectivamente puros por metodologia distinta da aqui apresentada<sup>2</sup>. Partiu-se de sistemas com número predominante de átomos de Na com subsequente adição de átomos de K. Verificou-se posicionamento externo dos átomos de K ao arranjo de átomos de Na nas estruturas de menor energia. Para o caso inverso (K predominante e adição posterior de Na), observou-se posicionamento mais aleatório destas espécies, onde os átomos de Na adicionados tiveram capacidade de se misturar ao arranjo de átomos de K.



**Figura 1.** Algumas estruturas obtidas após otimização pelo GA.

## Conclusões

As estruturas e suas energias foram obtidas, convergidas pelo GA, estão em acordo com a literatura e servirão como condição inicial para o devido tratamento quântico de tal sistema, que poderá permitir a análise de possíveis clusters com propriedades de vidros metálicos.

## Agradecimentos

Fapemig, CNPq e Capes.

<sup>1</sup> Guimarães, F. F.; Belchior, J. C.; Johnston, R. L. e Roberts, C. J. *Chem. Phys.* **2002**, *19*, vol. 116, 8327.

<sup>2</sup> Lai, S. K.; Hsu, P. J.; Wu, K. L.; Liu, W. K. e Iwamatsu, M. J. *Chem. Phys.* **2002**, *23*, vol. 117, 10715.

<sup>3</sup> Aguado, A. e López, J. M. J. *Chem. Phys.* **2010**, *133*, 094302.