

Estudo clássico de clusters metálicos de Mg_nAl_m ($n + m \leq 13$) descritos pelo potencial Gupta através de Algoritmos Genéticos.

Natália M. B. Ladeira¹ (IC), Raphael F. Ligório¹ (IC), Jadson C. Belchior¹ (PQ)*.

¹ Departamento de Química UFMG. *jadson@ufmg.br

Palavras Chave: clusters, magnésio, alumínio, Gupta, GA.

Abstract

Classical study of bimetallic cluster of Mg_nAl_m ($n + m \leq 13$) are optimized with Genetic Algorithm (GA). Gupta potential is used to describe all clusters. The preliminary analysis showed similar structures to other previous studies based on the same potential.

Introdução

Clusters metálicos são agregados de átomos em escala nanométrica que apresentam diferentes propriedades quando há modificações em seus tamanhos, conformações ou composições químicas. Do ponto de vista teórico o estudo dessas interações e propriedades contribui para o desenvolvimento de novos materiais (ex. vidros metálicos) [1]. Potenciais clássicos como Gupta têm sido largamente usados para simulações clássicas e quânticas.

O presente trabalho consiste em um estudo teórico de clusters metálicos de magnésio e alumínio através de potencial Gupta. As estruturas otimizadas via Algoritmos Genéticos (GA) podem ser usadas como condição inicial para estudos *ab initio*, já que essa metodologia tem demonstrado alto grau de eficiência [2] quando comparada com outros métodos, o que reduz fortemente a demanda computacional.

Resultados e Discussão

Embora vários GAs tenham sido propostos, neste trabalho usou-se o GA descrito na ref. [2], que se baseia no GA padrão [2] e dois novos operadores - aniquilador e história.

Estudou-se e comparou-se as estruturas geradas, energias potenciais (E) e energias médias de ligação (E_L) dos clusters de magnésio e alumínio puros e dos clusters $MgAl_x$ (2 até 13 átomos para os três casos). Adotou-se um n° máximo de gerações = 200 e n° de clusters na população inicial = 20. Os parâmetros empíricos do potencial Gupta foram obtidos da literatura e estão descritos na Tabela 1 [3].

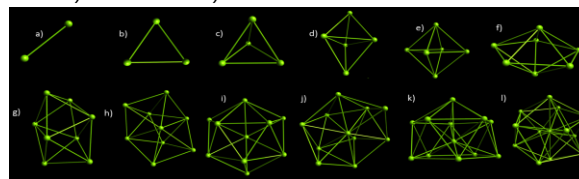
Tabela 1. Parâmetros empíricos do Pot. Gupta para o sistema Mg-Al [3]

Parâmetro	Mg-Mg	Mg-Al	Al-Al
A (eV)	2,723	1,423	0,1221
P	2,8024	5,7072	8,6120
r_0 (Å)	1,8582	2,3609	2,8637
ζ (eV)	-0,0221	0,6469	1,316
Q	0,7203	1,618	2,516

Para clusters puros, os resultados das geometrias estruturais dos clusters de Mg e Al foram essencialmente análogos entre si e estão de acordo com as estruturas descritas na literatura para sistemas deste tipo [4] (Figura 1).

Algumas disparidades nas distâncias de ligação dos clusters de Mg e Al puros podem ser justificadas pelos diferentes raios atômicos, que refletiram as diferentes distâncias interatômicas de equilíbrio fornecidas pelo potencial Gupta em cada composição.

Figura 1. Estruturas obtidas através do GA para os clusters de Mg e Al – a) 2 átomos até l) 13 átomos.



As energias potenciais e energias médias de ligação estão descritas na Tabela 2:

Tabela 2. Energias associadas aos clusters puros

	E/eV	E_L /eV		E/eV	E_L /eV
Mg ₂	-3,88157	1,94079	Al ₂	-2,99107	1,49553
Mg ₃	-7,3037	2,43457	Al ₃	-5,49935	1,83311
Mg ₄	-11,11906	2,77977	Al ₄	-8,25955	2,06489
Mg ₅	-14,73717	2,94743	Al ₅	-10,91381	2,18276
Mg ₆	-18,5502	3,09170	Al ₆	-13,77443	2,29574
Mg ₇	-22,3013	3,18590	Al ₇	-16,46989	2,35284
Mg ₈	-25,80392	3,22549	Al ₈	-19,16985	2,39623
Mg ₉	-29,66736	3,29637	Al ₉	-21,90636	2,43404
Mg ₁₀	-33,4728	3,34728	Al ₁₀	-24,72524	2,47252
Mg ₁₁	-37,24349	3,38577	Al ₁₁	-27,52109	2,50192
Mg ₁₂	-41,24948	3,43746	Al ₁₂	-30,51434	2,54286
Mg ₁₃	-45,77331	3,52103	Al ₁₃	-33,81178	2,60091

As estruturas obtidas a partir da dopagem dos clusters de Al com um átomo de Mg são análogas àquelas encontradas na Fig. 1, porém com algumas distorções e alongamentos. As energias potenciais dos mesmos encontraram-se entre os valores limítrofes dos clusters puros.

Conclusões

Os clusters puros de Mg convergidos através da descrição via potencial Gupta (GAs) mostraram-se mais estáveis que os de Al. Nas estruturas dopadas, quanto maior o número de átomos, menor a E_L .

Agradecimentos

À FAPEMIG e CNPQ pelo apoio financeiro.

[1] Rodrigues, D.D.C.; Nascimento, A.M.; Duarte, H.A.; Belchior, J.C. *Chem. Phys.* **2008**, 349, 91.

[2] Guimarães, F. F.; Belchior, J. C.; Johnston, R. L.; Roberts, C. J. *Chem. Phys.*, **2002**, 116, 8327.

[3] Dietrich, J. M.; Mata, R. A.; Gerke, S. J. *Phys. B.* **2012**, 648386, 8.

[4] Lai, S. K.; Hsu, P. J.; Wu, K. L.; Liu, W. K.; Iwamatsu, M. *J. Chem. Phys.* **2002**, 23, 10715.