

Exploring the energy of bimetallic clusters Au-Ag.

Augusto César Azevedo Silva ¹ (IC), Jaldyr de Jesus Gomes Varela Júnior ^{1*} (PQ)

¹ Universidade Federal do Maranhão, 65080-805, São Luís, MA, Brasil. jaldyr.varela@ufma.br

Palavras Chave: Agregados, Au, Ag, GA

Abstract

This work explore the energy of gold-silver bimetallic clusters between 6 and 30 atoms.

Introdução

Clusters ou nanopartículas são agregados atômicos ou moleculares constituídos por poucos ou milhares de átomos ou moléculas. A possibilidade da aplicabilidade destes sistemas nas áreas de catálise, nanoeletrônica e aplicações médicas têm motivado diversos estudos teóricos a cerca de suas propriedades eletrônicas e estruturais, por meio de diversas técnicas de modelagem como métodos semiempíricos e DFT.

O presente trabalho estudou a energética e o padrão de segregação de nanoclusters bimetalicos de Au-Ag.

Metodologia

No presente trabalho utilizou – se um algoritmo genético para a determinação e otimização das estruturas dos clusters bimetalicos, utilizando o potencial Gupta para a descrição dessas interações Au-Au, Au-Ag e Ag-Ag.

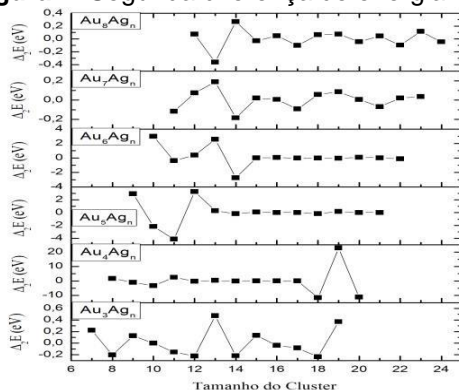
Cálculos baseados em DFT foram performados utilizando o pacote de programas siesta, utilizando o funcional PBE (GGA) usando as funções de base DZP com funções de polarização.

A análise energética e a estabilidade dos clusters foram realizadas determinando a segunda diferença de energia e a energia de ligação por átomo dos clusters.

Resultados e Discussão

A análise da segunda diferença de energia dos agregados bimetalicos de Au-Ag revelou que clusters com 12, 13,14, e 19 são as composições mais estáveis para cada série conforme a figura 1.

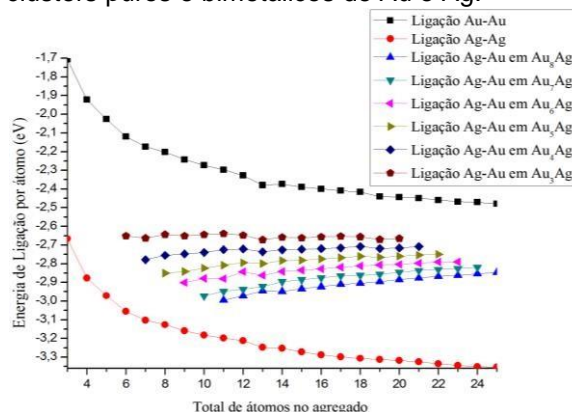
Figura 1. Segunda diferença de energia



Observou – se que as estruturas mais estáveis apresentam grupos pontuais de simetria do tipo C_{nv} e o mais instáveis apresentaram grupos de baixa simetria.

Os agregados bimetalicos segregam – se segundo o padrão núcleo camada, favorecida pela energia da ligação Au-Ag ser mais forte que a Au-Au e mais fraca que a Ag-Ag com a Ag segregando – se na superfície do cluster, vista que possui menor energia de ligação, como podemos observar na figura 2.

Figura 2. Energia de ligação por átomo em eV, nos clusters puros e bimetalicos de Au e Ag.



O algoritmo obteve excelente êxito na determinação das estruturas com taxas de sucesso entre 30% a 100%, demonstrando ser uma eficiente metodologia para a determinação destas estruturas.

Conclusões

Os clusters com 13 átomos são os mais estáveis das composições estudadas, o padrão de segregação destes clusters é core – camada em que a Ag tende a segregar – se na superfície do cluster, por possuir menor energia de ligação sendo portanto mais fraca que a ligação Au-Au, ao qual permanece no núcleo do cluster e a ligação Au-Ag.

Agradecimentos

CAPES e FAPEMA

¹Ferrando, R.; Jellinek, J. e Johnston, R. L. *Chemical Reviews*, **2008**, 108, 3.

²Marques, J.M.C; Pereira, F.B.; *Chemical Physics Letters*,**2010**, 485

³Deng, Q.; Zhao, L.; Feng, X.; Zhang, M. ; Zhang, W.; Fang, B.; Luo, Y. *Computational and Theoretical Chemistry*, **2011**, 976.