



Casa abierta al tiempo

Universidad Autónoma Metropolitana

Azcapotzalco

Estructura geométrica y electrónica de cúmulos bimetálicos Au–Ni mediante algoritmos genéticos y teoría de funcionales de la densidad

Óscar Olvera Neria, Alfonso Nájera Gil, Arnulfo Montoya Moreno

Área de Física Atómica Molecular Aplicada (FAMA), CBI, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Ciudad de México, 02200, México.

Tabla de Contenido

1	Resumen.....	3
1.1	Palabras Clave	3
2	Abstract.....	3
2.1	Keywords:.....	3
3	Referencias.....	3

1 Resumen

En este trabajo se estudió la estabilidad energética de los cúmulos de Au y Ni, así como de los bimetálicos Au-Ni. La búsqueda de los mínimos globales se llevó a cabo a través de una guía automatizada por algoritmos genéticos implementados en el programa USPEX. El criterio para determinar si una estructura permanece en la población fue la energía, de manera que el algoritmo genético favorece las estructuras más aptas, es decir, las de menor energía. Para probar que el algoritmo genético encuentra las estructuras más estables, se probó el Au₁₃ usando 50 generaciones y la estructura reportada en la literatura como semilla. La estructura localizada fue la reportada y corresponde a una estructura plana con un solo electrón desapareado. Para el Au₁₄ y Au₁₅, las estructuras fueron tridimensionales y altamente simétricas. Para los cúmulos de Ni₁₃, Ni₁₄ y Ni₁₅, las estructuras también fueron tridimensionales y simétricas. Debido a que los cúmulos de Ni presentan electrones desapareados, es necesario usar más de 20 generaciones. Para estos cúmulos, los potenciales clásicos no son adecuados para estudiar la estabilidad de cúmulos pequeños con momentos magnéticos elevados. Para los cúmulos bimetálicos Au₇Ni₆, Au₇Ni₇ y Au₇Ni₈, todas las estructuras localizadas fueron tridimensionales. El Au se segrega hacia la superficie del cúmulo, mientras que los átomos de Ni tienden a permanecer en el centro del cúmulo en posiciones en donde se maximiza el número de enlaces Au-Ni, los cuales estabilizan a las estructuras.

1.1 Palabras Clave

Cúmulos bimetálicos, algoritmo genético, mínimos globales, teoría de funcionales de la densidad.

2 Abstract

In this work, the energetic stability of the Au and Ni clusters was studied, as well as the Au-Ni bimetallics. The search for global minimums was carried out through an automated guide by genetic algorithms implemented in the USPEX program. The criterion to determine if a structure remains in the population was energy so that the genetic algorithm favors the most suitable structures, that is, those with the lowest energy. To prove that the genetic algorithm finds the most stable structures, the Au₁₃ was tested using 50 generations and the structure reported in the literature as seed. The localized structure was the one reported and corresponds to a flat structure with only one unpaired electron. For the Au₁₄ and Au₁₅, the structures were three-dimensional and highly symmetrical. For the Ni₁₃, Ni₁₄ and Ni₁₅ clusters, the structures were also three-dimensional and symmetric. Because Ni clusters have unpaired electrons, it is necessary to use more than 20 generations. For these clusters, the classical potentials are not suitable for studying the stability of small clusters with high magnetic moments. For the bimetallic clusters Au₇Ni₆, Au₇Ni₇, and Au₇Ni₈, all the structures located were three-dimensional. The Au segregates towards the surface of the cluster, whereas the atoms of Ni tend to remain in the center of the cluster in positions where the number of Au-Ni bonds is maximized, which stabilize the structures.

2.1 Keywords:

Bimetallic clusters, genetic algorithm, global minimums, density functional theory.

3 Referencias

1. Alfons M. Molenbroek, Jens K. Nørskov, Bjerne S. Clausen. *Structure and reactivity of Ni–Au nanoparticle catalysts*. J. Phys. Chem. B, (2001), p. 5450-5458.

2. Oganov A.R., Glass C.W. *Crystal structure prediction using evolutionary algorithms: principles and applications*. J. Chem. Phys. **124**, (2006), art. 244704.