

Estudio de Primeros Principios para Clusters Metálicos de Plata y Bismuto

Rodríguez Mendoza Esteban de Jesús¹, Zacarias da Silva Edinson² and Beltrán Ríos Carlos Leonardo¹.

1- Department of Physics, Industrial University of Santander, Bucaramanga, 680002, Colombia, 2- Gleb Wataghin Physics Institute, Campinas State University, Campinas, CP 6165, Brazil

Universidad
Industrial de
Santander



1. Introducción

Las nanopartículas han despertado un gran interés en la comunidad científica por su gran rango de aplicaciones y propiedades excepcionales, siendo aún más interesantes las nanoaleaciones ya que combinan las propiedades de las nanopartículas constituyentes y además presentan propiedades únicas [1-2], sin embargo, el origen de sus propiedades magnéticas aún es fuente de discusión. En específico, en esta investigación se estudiaron las propiedades estructurales, magnéticas y electrónicas, de clusters icosaédricos de plata con un átomo de bismuto como la menor aproximación de las nanoaleaciones de plata con bismuto, para ello, se estudió el cambio de las densidades de estados proyectadas por átomo para distintos clusters propuestos.

2. Implementación de Software

Para el desarrollo de esta investigación se utilizó el software de código abierto Quantum espresso[3] en su versión número 6.1. Los diferentes clusters se simularon dentro de una celda unitaria tridimensional cuadrada con 35 Å de lado, para aislarla de la periodicidad del sistema. Se utilizó el punto Gamma como único punto del espacio recíproco, un smearing tipo Fermi-Dirac de 0.0007 [Ry] y pseudo potenciales del tipo PBE con funciones de onda planas aumentadas (PAW).

3. Propiedades Estructurales

Una vez definidos los parámetros necesarios para simular nuestros clusters, el sistema se relajó a partir de unas coordenadas propuestas inicialmente. En ambos casos se obtuvo una estructura estable, evidenciando un incremento de las distancias del cluster de $Ag_{12}Bi_C$ respecto al cluster de Ag_{13} y en quiebre de la simetría icosaédrica en la estructura de $Ag_{12}Bi_L$ mostrando un aumento de las distancias para los átomos de plata más próximos al átomo de bismuto y menores distancias para los átomos de plata más lejanos.

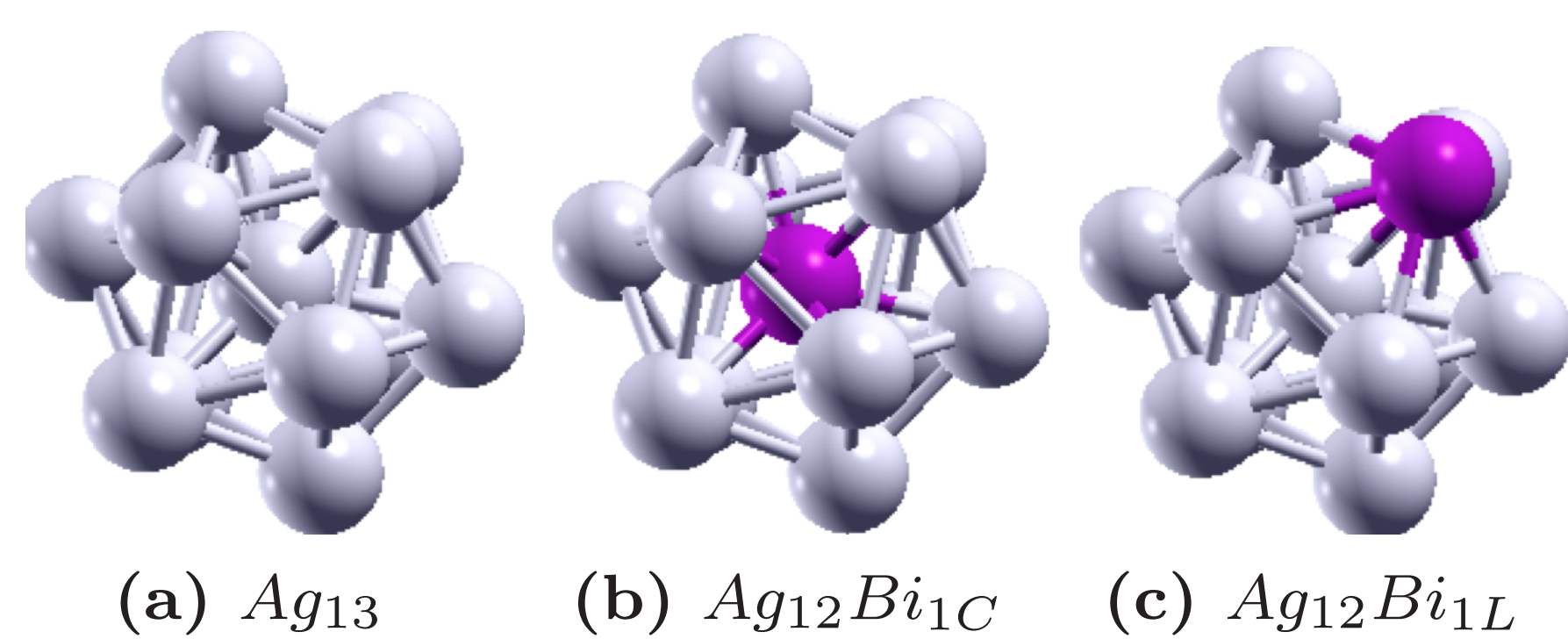


Figure 1: Ag and Bi Clusters

Analizando las energías totales del sistema para los clusters de $Ag_{12}Bi_L$ y $Ag_{12}Bi_C$, se obtuvo que la energía total para el cluster de $Ag_{12}Bi_L$ fue mucho menor, esto debido a que al ubicarse en esta posición el átomo de bismuto disminuye la repulsión electrostática con los demás átomos de plata, que produce una estructura más estable al pasar de

7. References

- [1] Zhengbo Jiao et al, Bi-Ag Alloy Nanospheres: A New Photocatalyst for H₂ Evolution from Water Splitting', ACS Appl Mater Interfaces (2014).
- [2] Thales R. Machado et al, From Complex Inorganic Oxides to Ag-Bi Nanoalloy: Synthesis by Femtosecond Lases Irradiation, ACS Omega, 9880-9887 (2018).
- [3] GIANNOZZI, P. et al. Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. Journal of physics: Condensed matter, IOP Publishing, v. 21, n. 39, p. 395502, 2009.

4. Propiedades Magnéticas

Analizando la densidad de estados proyectadas para los diferentes clusters se evidenció una disminución en la magnetización al introducir el átomo de bismuto tanto en la posición lateral como en la posición central, pasando de 5 μ_B para el cluster de Ag_{13} a 3 μ_B para los clusters de $Ag_{12}Bi_C$ y $Ag_{12}Bi_L$, debido a la parcialidad de ocupación de los estados Up y Down cerca al nivel de Fermi.

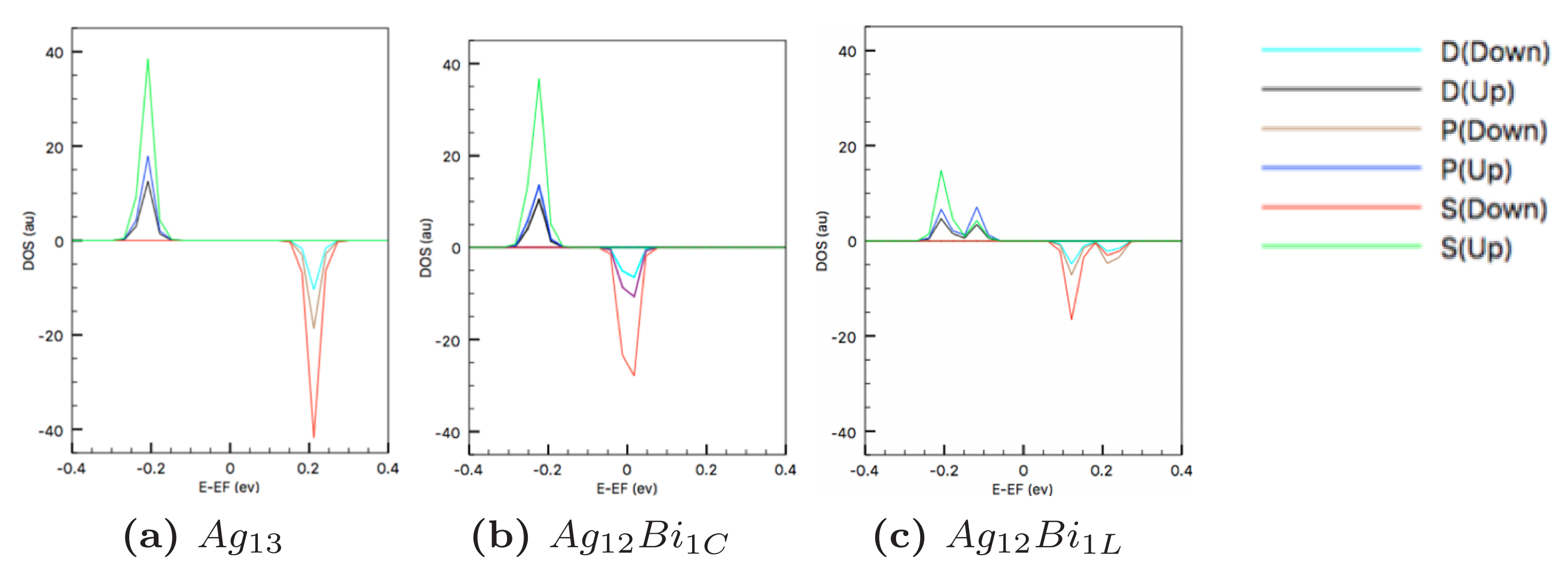


Figure 2: Densidad de Estados Proyectada cerca al nivel de Fermi para los tres clusters.

5. Propiedades Electrónicas

Debido a que el átomo central de los clusters de Ag_{13} y $Ag_{12}Bi_C$ posee un mayor número de coordinación, esto facilita el proceso de transferencia de carga hacia este que da como resultado en una disminución del aporte a la magnetización por parte de este (figuras 3-B y 4-B). Por otro lado, la ubicación del átomo de bismuto lateral produjo un quiebre en la simetría del sistema que favoreció la magnetización de este cluster.

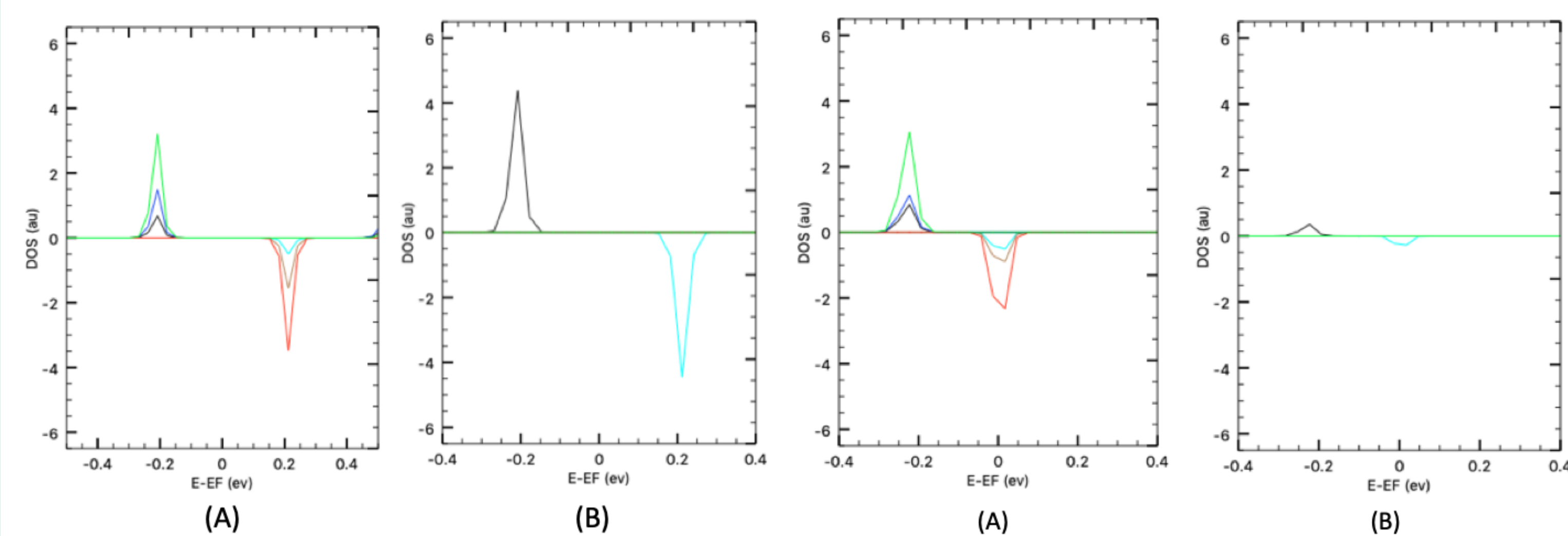


Figure 3: Dos. átomo lat. (A) y central (B) Ag_{13}

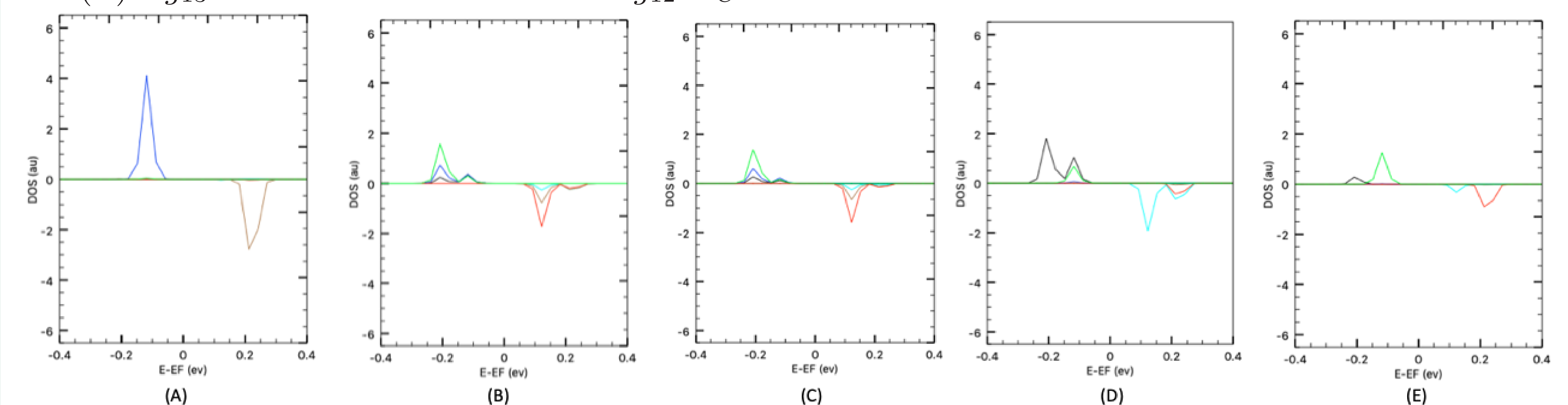


Figure 4: Dos. átomo lat.(A) y cent. (B) $Ag_{12}Bi_C$

Figure 5: Dos. para átomo de bismuto (A), 1er vecino (B), 2ndo vecino, lejano (C) y central (D) $Ag_{12}Bi_L$

6. Conclusiones

1. La repulsión electrostática favoreció la ubicación del átomo de plata en las posiciones laterales y se espera que este fenómeno ocurra en las nanopartículas también.
2. La presencia del átomo de bismuto tiende a disminuir la magnetización de los clusters propuestos tanto en la posición lateral como central.