

Título em Português:	Estudo ab initio das Propriedades Físicas e Químicas de Nanoligas de Metais de Transição (63 sistemas)
Título em Inglês:	Ab initio Investigation of the Physical and Chemical Properties of Transition Metal Nanoalloys (63 systems)
Área de Pesquisa:	Físico-Química
Palavras Chave:	Química Quântica - DFT - Nanoligas
Ag. Financiadora do Projeto:	USP - Programa Unificado de Bolsas
Projeto:	Iniciação Científica
Unidade de Apresentação:	Instituto de Química de São Carlos
Departamento:	
Validado em:	30/09/2020

Autor:

Nome: Felipe Orlando Morais **Unidade:**

Instituição: Universidade de São Paulo

Orientador:

Nome: Juarez Lopes Ferreira da Silva Instituição: Universidade de São Paulo
Unidade: Instituto de Química de São Carlos

Colaborador:

Nome: Karla Furtado Andriani Instituição: Instituto de Química de São Carlos

Resumo do Trabalho em português:



Estudo *ab initio* das Propriedades Físicas e Químicas de Nanoligas de Metais de Transição (63 sistemas)

Felipe O. Morais, Karla F. Andriani, Juarez L.F. Da Silva

Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo

felipeom@usp.br

Objetivos

Este projeto tem como objetivo estudar as propriedades estruturais, eletrônicas e energéticas de nanoligas A_2B_6 , A_4B_4 e A_6B_2 (A , $B = \text{Al, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga}$), através de uma abordagem teórica utilizando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), bem como empregar ferramentas de programação e aprendizado de máquina para otimizar etapas dessa investigação.

Métodos e Procedimentos

Os cálculos *ab initio* de DFT foram realizados usando o pacote de programas FHI-Aims. Primeiramente foram estudados os clusters puros de 8 átomos dos elementos mencionados com dados estruturais de trabalhos anteriores do grupo[1]. Para capturar as tendências estruturais desses clusters, os conjuntos de unários reotimizados foram reduzidos a um conjunto representativo de 10 estruturas aplicando um algoritmo de aprendizado de máquina não supervisionado chamado *K-means*[2]. Foi desenvolvido um *script* em *Python* que, nas 10 geometrias representativas “congeladas”, realiza todas as permutações possíveis de átomos para nossas composições de interesse. Depois de realizar todas essas permutações, empregamos novamente o algoritmo *K-means* para selecionar 10% das estruturas no conjunto de cada composição, as quais foram submetidas aos cálculos de DFT.

Resultados

Através da aplicação da DFT foi possível calcular diversas propriedades estruturais, energéticas e eletrônicas das nanoligas de 8 átomos (e.g., número de coordenação, energia de ligação, momento magnético, etc.), bem

como compreender alguns mecanismos de estabilidade desses sistemas empregando ferramentas de estatística e visualização. Verificamos que nanoligas de Zn, sobretudo CuZn, se mostraram reativas através do seu elevado gap HOMO-LUMO, e também que a inclusão de metais ferromagnéticos (Fe, Co, Ni) permite controlar a susceptibilidade magnética do sistema, visto que o momento magnético aumenta linearmente com a presença desses elementos. Calculando a estabilidade relativa da liga em comparação com as energias dos clusters puros, a combinação AlNi se mostrou a mais energeticamente favorável, seguida pelas ligas de AlGa e pela combinação Al_6Cu_2 . Para nanoligas Al_2Ni_6 e Al_4Ni_4 , a estabilidade energética está correlacionada com o maior número de ligações heterogêneas Al-Ni.

Conclusões

Pela sua reatividade, observamos que nanoligas de Zn podem ser promissoras no âmbito da catálise química (Oxidação de CH_4 , conversão de CO_2 , etc). Além disso, a metodologia desenvolvida neste trabalho, combinando programação e aprendizado de máquina para o estudo de nanoligas, mostrou-se efetiva e pode ser empregada para investigar clusters com outros tamanhos e composições, possibilitando obter sistemas inéditos com suas propriedades particulares.

Referências Bibliográficas

- [1] Chaves, A. S., Piotrowski, M. J., Da Silva, J.L.. Phys. Chem. Chem. Phys. **2017**, 19(23), 15484-15502.
- [2] A.K. Jain, M. N. Murty, and P.J. Flynn, “Data clustering: A review”, ACM Comput. Surv. **1999**, vol. 31, pp. 264-323.