



ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y MAGNÉTICAS DE CÚMULOS PEQUEÑOS DE CROMO

Sarai López-Olay¹, Omar López-Estrada¹, Andrea Aburto², Emilio Orgaz¹

¹Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, CP 04510, México, D.F. México.

²Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, CP 04510, México, D.F. México.

eunice.olay@gmail.com

Los experimentos recientes de espectroscopia de dicroísmo circular magnético de rayos-X han demostrado un estado fundamental de multiplicidad 12 en el cúmulo de Cr_2^+ [1]. La precisión de estos experimentos abre la posibilidad de observar partículas magnéticas pequeñas con un detalle mucho más preciso que aquellos obtenidos en los arreglos de Stern-Gerlach. En particular los cúmulos de cromo, en los cuales se puede observar una alta magnetización total[2], son un candidato excelente para ser estudiados en estos experimentos sofisticados. En el presente trabajo el dímero y el trímero se han estudiado por medio de métodos ab-initio a temperatura cero con el fin de definir una metodología confiable para sistemas de más átomos. El tetrámero se ha investigado exhaustivamente a través de métodos ab-initio a temperatura cero y temperatura finita. Hemos encontrado la existencia de una competencia de estructuras de distinta multiplicidad en el cúmulo Cr_4 . Ambas estructuras están cercanas en geometría permitiendo que la polarización de espín se invierta a través de un mecanismo de acoplamiento espín-órbita.

[1] Zamudio-Bayer, V.; Hirsch, K.; Langenberg, A.; Niemeyer, M.; Vogel, M.; Lawicki, A.; Terasaki, A.; Lau, J. T.; Von Issendorff, B. Maximum Spin Polarization in Chromium Dimer Cations as Demonstrated by X-ray Magnetic Circular Dichroism Spectroscopy. *Angewandte Chemie - International Edition* **2015**, 54, 4498–4501.

[2]Hirsch, K.; Zamudio-Bayer, V.; Ameseder, F.; Langenberg, A.; Rittmann, J.; Vogel, M.; Möller, T.; V. Issendorff, B.; Lau, J. T. 2p x-ray absorption of free transition-metal cations across the 3d transition elements: Calcium through copper. *Physical Review A- Atomic, Molecular, and Optical Physics* **2012**, 85, 062501.