



TRANSFORMACIONES ESTRUCTURALES EN CÚMULOS METÁLICOS

Omar López-Estrada^{1,2}, Emilio Orgaz¹, Francesca Baletto²

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

²Physics Department, King's College London. WC2R 2SL, London, UK.

Por medio de cálculos ab-initio que incluyen restricción de espín y de simulaciones Born-Oppenheimer a temperatura finita, hemos investigado las propiedades electrónicas y magnéticas de nanopartículas de Al, AlNi y AlPt de 19 átomos. Un análisis de vecinos comunes[1] nos ha sido de utilidad para detectar las transformaciones estructurales a lo largo de simulaciones Born-Oppenheimer. A temperatura finita hemos observado que el eje de simetría de cinco átomos se mantiene, pero en ocasiones éste se transforma en un doble decaedro, en una mezcla de un icosaedro y un decaedro de 13 átomos, o muestra una distorsión espiral que resulta en la formación de caras (100). Además cada forma estructural tiene un comportamiento magnético, usualmente de orden ferromagnético. Sin embargo una disminución de la magnetización total ocurre cuando la superficie está limitada por caras (100) asociadas a la aparición de un ordenamiento antiferromagnético.

[1] L. Pavan, K. Rossi, F. Baletto, J. Chem. Phys. 143 (18), 184304 (2015).