

## Correções do artigo “Um Problema de Interferência Quântica em Nanoestruturas Metálicas” ([531-1194-1-RV.pdf](#) - 2011-10-21)

Agradecemos ao revisor pelas sugestões e enviamos a seguir, além das alterações realizadas em função dessas sugestões, algumas outras.

Correções sugeridas pelo revisor A

1. Estão presentes diversos erros de digitação e gramaticais, como “estabelicidos” (pag. 1); “segragação” (pag. 2); substitucionais (pag. 6), constitutído (pag. 7); localização (pag. 10); etc Erros de digitação e gramaticais.

Comentário: Erros corrigidos

2. As referências devem ser citadas em ordem crescente de citação (estão citadas em ordem aleatória);

Comentário: Apesar de concordarmos com o parecerista, quanto à disposição na qual as referências devem ser colocadas no artigo, no item 6 do modelo para confecção de artigos, existe a exigência que “as referências bibliográficas devem estar em ordem alfabética do sobrenome do primeiro autor”.

3. a) Primeiro e segundo parágrafo: faltam referências que corroborem estas afirmações que são revisão de literatura e não fazem parte dos resultados deste trabalho.

Comentário: Referências introduzidas de forma a melhorar a revisão sobre o tema.

- T. Costa Jr., A. C. de Castro Barbosa, J. d'Albuquerque e Castro e R. B. Muniz, Effects of impurities on the exchange coupling in magnetic metallic multilayers, {\em J. Phys.: Condens. Matter} {\bf 13} (2001) 1827-1837.
- J. Kudrnovsky, V. Drchal, I. Turek e P. Weinberger, {\em Phys. Rev B} {\bf 50} 16105- (1994).

b) Terceiro parágrafo – os autores devem explorar melhor a primeira frase descrevendo qual o comportamento oscilatório observado nas ref. 11 e 12.

Comentário: Substituímos a frase

“Foi observado por Tsong e colaboradores o aparecimento de um comportamento oscilatório na composição de ligas metálicas próximo à superfície \cite{segrega1,segrega2}”

por

“Foi observado por Tsong e colaboradores o aparecimento de um comportamento oscilatório na composição de ligas metálicas próximo à superfície como, por exemplo, em ligas do tipo Pt-Rh e Pt-Ni, em que as composições do Rh e do Ni variam plano a plano, a partir da superfície, de forma decrescente em relação à concentração do volume \cite{segrega1,segrega2}”.

4. Na seção Modelagem do Sistema – pag. 2:

a) A segunda frase é muito básica para um artigo científico e sugiro que seja removida, pois as informações relevantes para a modelagem e o entendimento do artigo estão presentes no primeiro parágrafo desta seção

Comentário: conforme sugestão do avaliador, a 2ª frase foi retirada. Além disso, os dois primeiros parágrafos foram reescritos. A intenção nesses parágrafos é a de indicar a localização dos Metais de Transição na Tabela Periódica dos Elementos e descrever simplificada a sua estrutura.

Texto antigo que foi reescrito

Ao longo de cada série na tabela periódica, as bandas **d** vão sendo progressivamente preenchidas, estando totalmente ocupadas nos metais nobres. Os metais de transição se encontram no centro da tabela periódica e são representados pelas três séries **3d**, **4d** e **5d**, que se iniciam no escândio, ítrio e lantânio, terminando no níquel, paládio e platina, respectivamente, precedendo os metais nobres cobre, prata e ouro.

A estrutura eletrônica dos metais de transição pode ser analisada com base na estrutura eletrônica atômica da seguinte forma: ...

Texto novo reescrito

Os metais de transição são representados pelas séries **3d**, **4d** e **5d** que se encontram no centro da tabela periódica. A estrutura eletrônica desses metais pode ser analisada com base na estrutura eletrônica atômica da seguinte forma: ...

b) Nesta seção faltam referências bibliográficas que comparem estes modelos com a literatura.

Comentário: algumas referências foram incluídas como suporte teórico para o modelo.

- N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, "Física do Estado Sólido", Cengage Learning, São Paulo, 2011.
- A. L. Companion, "Ligação Química", Edgard Blücher, São Paulo, 1970.
- H. Ehrenreich e D. Turnbull, Solid State Physics: Advances in Research and Applications, vol. 23, Academic Press, New York, 1969.
- E. N. Economou, "Green's Function in Quantum Physics", Springer Series in Solid State Science, Springer-Verlag, vol. 7, Berlin, 2010.
- J. d'Albuquerque e Castro, A. C. de Castro Barbosa e M. V. Tovar Costa, Quantum interference effects on the segregation energy in diluted metallic alloys, {em Phys. Rev. B} {\bf 70}, No. 16 (2004), 165415.

5. Na seção sobre "Funções de Green e Densidade de Estados" é necessário a interação com a literatura por meio de citações e demonstração da viabilidade deste método para clarear o entendimento dos leitores sobre o tema.

Comentário: os artigos que seguem, junto com os que já estão presentes no texto original, fornecem a discussão necessária quanto à viabilidade do método utilizado.

- G. Allan e P. Lengart, Electronic Surface States in Cubic Lattice, {em Surf. Sci.} {\bf 30} (1972) 641-652.
- H. Ehrenreich e D. Turnbull, Solid State Physics: Advances in Research and Applications, vol. 23, Academic Press, New York, 1969.
- M. P. Lopez Sancho, J. M. Lopez Sancho e J. Rubio, Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions, {em J. Phys. F: Met. Phys.} {\bf 15} (1985) 851-858.

6. Na seção de resultados os autores devem justificar a escolha dos valores de  $n=0.94$  e  $0,54$  (Ni e Cr) e não para outros elementos já que a hibridização s-d varia consideravelmente entre diferentes metais de transição. Acho essencial fazer testes para outros elementos e apresentar nos resultados de forma a tornar o artigo mais completo e conciso.

Comentário: completamos o artigo explicando a origem das ocupações eletrônicas, correspondes aos elementos anteriormente considerados (Ni e Cr) e, como foi sugerido pelo parecerista, incluímos mais um exemplo.

Consideramos o elemento Co, que apresenta uma diferença de valência menor em relação ao Ni do que o Cr. Vale aqui ainda duas observações. Não estamos levando em conta a hibridização s-d e colocamos apenas esses dois exemplos, Cr e Co, que refletem o comportamento oscilatório da energia de segregação observado em diversos trabalhos experimentais (citados no texto).

Atenciosamente,

Augusto Cesar de Castro Barbosa