

MAGNETISMO EM NANOESTRUTURAS E BULK VIA MÉTODOS AB INITIO

Ronan Caio Silva¹, Ângela B. Klautau²

Universidade Federal do Pará, ¹ronan.caio10@gmail.com, ²aklautau@ufpa.br.

O estudo das interações magnéticas em sistemas bulk e nanoestruturas permite o acesso a origem microscópica de algumas propriedades desses materiais, e também a predição de propriedades tais como temperatura crítica, susceptibilidade magnética, existência de magnetismo não colinear etc. Neste trabalho, utilizamos cálculos de primeiros princípios através do método Real Space Linear Muffin-Tin Orbitals Atomic Sphere Approximation (RS-LMTO-ASA), o qual é baseado na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), a fim de investigar e quantificar as diferentes contribuições para as interações de troca de Heisenberg (J_{ij}) e de Dzyaloshinskii-Moriya (DM), bem como para com o magnetismo induzido pela superfície de W(001) em dímeros de Cr, Mn e Fe adsorvidos na superfície de W(001). Adicionalmente, estudamos propriedades magnéticas estáticas de sistemas bulk de Fe e Co através de cálculos de dinâmica de spin atômica. Primeiramente, apresentamos os resultados obtidos para os momentos magnéticos orbitais e de spin, bem como os valores dos parâmetros de acoplamento simétrico (J_{ij}) e antissimétrico (DM) entre os dímeros no estado fundamental. Discutimos brevemente o papel da hibridização dos orbitais d dos nanosistemas com os elétrons do substrato e a relevância da interação spin-órbita. Nos sistemas bulk de Fe e Co, analisamos a variação da magnetização total em função da temperatura e sua dependência em relação ao tamanho do sistema, com o objetivo de determinar a temperatura de Curie e a susceptibilidade magnética desses metais.

Palavras-chave: Magnetismo, Nanomagnetismo.