



ORIGEM MICROSCÓPICA DE INTERAÇÕES DE TROCA HEISENBERG E NÃO-HEISENBERG NO FE BCC MAGNÉTICO.

Y. O. Kvashnin¹, R. Cardias², A. Szilva¹, I. Di Marco¹, M. I. Katsnelson^{3,4}, A. I. Lichtenstein^{4,5}, L. Nordström¹, A. B. Klautau², and O. Eriksson¹

¹*Department of Physics and Astronomy, Division of Materials Theory, Uppsala University, Box 516, SE-75120 Uppsala, Sweden.*

²*Faculdade de Física, Universidade Federal do Pará, Belém, Pará 66075-110, Brazil.*

³*Radboud University of Nijmegen, Institute for Molecules and Materials, Heijendaalseweg 135, 6525 AJ Nijmegen, Netherlands.*

⁴*Theoretical Physics and Applied Mathematics Department, Ural Federal University, Mira Street 19, 620002 Ekaterinburg, Russia.*

⁵*Institute of Theoretical Physics, University of Hamburg, Jungiusstrasse 9, 20355 Hamburg, Germany.*

Por meio de cálculos de primeiros princípios, nós investigamos a natureza do acoplamento de troca no Fe bcc em nível microscópico. A análise da estrutura eletrônica básica revela uma diferença drástica entre os orbitais 3d das simetrias Eg e T2g. Estes últimos definem a forma da superfície de Fermi, enquanto os primeiros formam níveis de impureza que interagem fracamente. Demonstramos que, como resultado disso, em Fe os orbitais T2g participam de interações de troca, os quais são apenas fracamente dependentes da configuração dos momentos de spin e, portanto, podem ser classificados como semelhantes a Heisenberg. Esses acoplamentos são mostrados para serem acionados pelo assentamento de superfície Fermi. Em contraste, para os estados Eg, a imagem de Heisenberg se quebra, pois a contribuição correspondente às interações de troca é mostrada como fortemente dependente do estado de referência do qual são extraídos. Nossa análise do acoplamento de vizinho mais próximo indica que as interações entre estados Eg são principalmente proporcionais à integral de *hopping* correspondente e, portanto, podem ser atribuídas a uma origem de troca dupla. Ao fazer uma comparação com outros metais de transição magnética, colocamos os resultados do Fe bcc em contexto e argumentamos que o ferro tem um comportamento único quando se trata de interações de troca magnética.