



**REENCONTROS  
NOVOS ESPAÇOS  
OPORTUNIDADES**

**XXXIV SIC** Salão Iniciação Científica

**26 - 30  
SETEMBRO  
CAMPUS CENTRO**

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2022
<b>Local</b>	Campus Centro - UFRGS
<b>Título</b>	Estudo da anisotropia magnética em camadas ultrafinas de cobalto: uma abordagem de primeiros princípios
<b>Autor</b>	LUCAS PEIXOTO HOFF
<b>Orientador</b>	SERGIO GARCIA MAGALHAES

Em materiais magnéticos, a principal característica a ser estudada é a anisotropia magnética, que está relacionada com a direção espacial da magnetização. Uma forma de estudar ela é utilizar cálculos computacionais de mecânica quântica, onde pode ser obtida a Energia de Anisotropia Magnética (MAE), que é a energia associada à magnetização do material em uma dada direção. Esta energia pode ser obtida a partir da Teoria de Funcionais de Densidade (DFT) determinando-se a energia livre no material através da mudança de orientação dos momentos magnéticos em um sistema. Neste trabalho procurou-se analisar o comportamento da MAE em monocamadas e camadas ultrafinas de cobalto. Foi estudado inicialmente a dependência da MAE com a pressão em uma monocamada hexagonal de cobalto. Posteriormente foi estudado a dependência da MAE com o número de camadas de cobalto, nas fases hexagonal e cúbica. Para tal, utilizou-se o pacote computacional VASP (Vienna Ab initio Simulation Package), empregando os métodos de pseudopotenciais, condições de contorno periódicas e de supercélulas. Os cálculos realizados pelo VASP são baseados em DFT, onde as funções de ondas dos elétrons são tratadas com uma combinação de ondas planas. A partir da energia livre obtida nos cálculos, a MAE foi determinada subtraindo a energia livre associada aos momentos magnéticos orientados paralelamente ao plano da camada da energia livre associada aos momentos magnéticos orientados perpendicularmente ao plano. Foi observado que a MAE para uma monocamada de Co é máxima quando a pressão é nula e reduz conforme ela se expande. Notou-se que aumentando o número de camadas de cobalto: (i) na fase cúbica uma oscilação na MAE ocorre para poucas camadas (até 4 camadas) e posteriormente apresenta um comportamento quase constante. (ii) Já na fase hexagonal, para um número de camadas maior que dois, ocorre uma inversão do eixo de fácil magnetização do material.