



XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

Evento	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2023
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Comportamento da energia de anisotropia magnetocristalina em filmes finos de BiCo em fase hexagonal
Autor	LUCAS PEIXOTO HOFF
Orientador	MILTON ANDRE TUMELERO

Comportamento da energia de anisotropia magnetocristalina em filmes finos de BiCo em fase hexagonal

Aluno: Lucas Peixoto Hoff

Orientador: Milton André Tumelero

Heteroestruturas são estruturas formadas por dois ou mais materiais diferentes. Esse tipo de junção permite a observação de certos fenômenos que não são vistos quando observamos os materiais isolados. Em certos casos, a união de um material magnético com um não-magnético com forte acoplamento spin-órbita podem fazer surgir anisotropias magnéticas no material, como por exemplo a anisotropia magnetocristalina. Esse tipo de anisotropia está associada com a magnetização, ou seja, com a orientação dos momentos magnéticos. Tendo em vista isso, o projeto teve como objetivo estudar o comportamento da energia de anisotropia magnetocristalina (MAE) em filmes finos formados pela união de camadas de bismuto, que apresenta forte acoplamento spin-órbita e é não-magnético, com cobalto, que é um material magnético. Para determinar essa energia, foram utilizadas células unitárias de estruturas heterogêneas de BiCo na fase hexagonal como base para a realização das simulações. Cada uma dessas células foi confeccionada por meio do programa VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis). As simulações para determinar o valor da energia foram realizadas através do pacote VASP (Vienna Ab Initio Simulation Package), o qual utiliza uma abordagem de primeiros princípios por meio de técnicas de DFT (Density Functional Theory). Todas as simulações foram realizadas nos computadores de alto desempenho do CENAPAD-SP no ambiente Lovelace (Dell AMD EPYC 7662 / NVIDIA Tesla A100). Para os resultados obtidos até o momento, observou-se duas coisas: a MAE apresentou um comportamento oscilatório inicial, quando em função do número de camadas de bismuto (para um número fixo de camadas de cobalto); quando há uma dependência com o número de camadas de cobalto (para um número fixo de camadas de bismuto), a MAE apresentou um comportamento convergente e sem periodicidades, cujo valor final pode estar próximo da energia de anisotropia magnetocristalina do *bulk* do material simulado.