

070

ESTRUTURA ELETRÔNICA E PROPRIEDADES MAGNÉTICAS LOCAIS DE NITRETOS VANÁDIO E CROMO. *Leandro Benedetti, João Carlos Krause (orient.)* (URI).

Considerando a atual atenção na síntese de novos materiais, os nitretos de metais de transição tem sido estudados por vários métodos teóricos e experimentais. Nesta linha, investigamos as propriedades magnéticas de nitretos de Cromo e Vanádio nas estruturas cfc tipo perovskita e cloreto sódio. Neste trabalho utilizamos o método variacional discreto de primeiros princípios na aproximação de carga auto-consistente (DVM), com o qual investigamos a estrutura eletrônica e as propriedades magnéticas locais dos nitretos V_4N , Cr_4N , VN e CrN . Para o Cr_4N utilizamos um parâmetro de rede de 7.212 u.a. e 7.7932 u.a. para o V_4N , dados obtidos de cálculos com o LMTO. Para o CrN utilizamos um parâmetro de rede de 7, 8449 u.a. e para o VN 7, 8204 u.a., sendo estes valores obtidos de dados experimentais. Dos cálculos obtivemos para o sitio do córner (CrI) do Cr_4N uma transferência de carga de -0.12é e um momento magnético de $0.36\mu B$, para o sitio de face centrada (CrII) a carga transferida foi de 0.21é e um momento de $0.60\mu B$ e para o sitio do nitrogênio a carga transferida foi de -0.23é e o momento de $0.02\mu B$. Para o V_4N obtivemos para o sitio VI uma carga transferida de 0.27é e um momento de $0.79\mu B$, para sitio VII obtemos uma carga transferida de -0.04é e um momento de $0.005\mu B$ e para o sitio do nitrogênio uma carga transferida de -0.34é e um momento de $-0.12\mu B$. Para o CrN , obtemos para o Cr uma carga transferida de 0.30é e um momento de $-1.48\mu B$, para N obtemos uma carga transferida de -0.63é e um momento de $-0.01\mu B$. Para o VN obtivemos para o V uma carga transferida de 0.53é e um momento de $0.003\mu B$, para o N obtivemos uma carga transferida de -0.39é e um momento de $-0.009\mu B$.