

## Artigo

## Cálculo de Energia de Formação, Energia de Coesão e Estrutura de Bandas dos Filmes Finos $\text{Fe}_6\text{Ar}$ e $\text{Fe}_6\text{Cl}$

Anibele, T. P.;\* dos Santos, A. V.

Rev. Virtual Quim., 2017, 9 (3), 877-888. Data de publicação na Web: 15 de maio de 2017

<http://rvq.sbq.org.br>

### Calculation of Formation Energy, Cohesion Energy and Band Structure of $\text{Fe}_6\text{Ar}$ and $\text{Fe}_6\text{Cl}$ Thin Films

**Abstract:** Currently, the interest on studying thin films has been intensified, due to its wide application. Thin films are defined as layers thinner than 10 angstroms, forming a single monolayer or multilayers with thickness of tens of angstroms. There are still many issues to be resolved about these materials, thus enabling theoretical studies, ranging from quantum wells to calculations of band structures. On the other hand, the development of new experimental techniques has advanced a lot in the last years, providing the faster and less costly construction of this new class of materials. The structural and magnetic properties of ultrafine films  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  and  $\text{Fe}_6\text{Cl}$  were calculated to verify if these films can have magnetic applications on industrial scale. The calculations were performed in the Wien2k computational code, which has several calculation parameters called Generalized Gradient Approximations (GGAs). In this paper the Perdew-Burke-Ernzerhof parameterization of 1996 (PBE 96) was used. The most stable thin film is the one with the most negative cohesion energy, i.e.  $\text{Fe}_6\text{Cl}$ , in the ferromagnetic phase. Fine films have positive energy. The most easily formed are the paramagnetic states of the two films studied. In relation to the Bulk modulus, among the thin films seen, the ferromagnetic  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  is the one that has the lowest resistance to compression, with 52,5748 GPa, while the largest Bulk module is the  $\text{Fe}_6\text{Cl}$  paramagnetic film, which is 125,9125GPa. The magnetic moment calculations indicate that the two thin films have reasonable magnetization and are close to each other.


**Keywords:** Thin films; cohesive energy; magnetic properties.

### Resumo

Atualmente, o interesse no estudo de filmes finos intensificou-se, devido a sua ampla aplicação. Filmes finos são definidos como camadas com espessura inferior a 10 angstroms, formando uma única monocamada ou multicamadas com espessuras da ordem de dezenas de angstroms. Existem ainda muitas questões a serem resolvidas acerca desses materiais, possibilitando assim estudos teóricos, que vão desde poços quânticos até cálculos de estruturas de bandas. Por outro lado, o desenvolvimento de novas técnicas experimentais avançou nos últimos anos, proporcionando a construção, mais rápida e com menores custos, dessa nova classe de materiais. Foram calculadas as propriedades estruturais e magnéticas dos filmes ultrafinos  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  e  $\text{Fe}_6\text{Cl}$ , a fim de verificar se esses filmes podem ter aplicações magnéticas em escala industrial. Os cálculos foram realizados no código computacional Wien2k, que possui parametrizações de cálculo chamadas GGAs (Generalized Gradient Approximations). Neste artigo foi utilizada a parametrização Perdew-Burke-Ernzerhof de 1996 (PBE 96). O filme fino mais estável é o que possui energia de coesão mais negativa, ou seja, o  $\text{Fe}_6\text{Cl}$ , na fase ferromagnética. Os filmes finos possuem energia de formação positiva e os que se formam com mais facilidade são os estados paramagnéticos dos dois filmes estudados. Com relação ao módulo de Bulk, dentre os filmes finos vistos, o  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  ferromagnético é o que possui menor resistência à compressão, com 52,5748 GPa. Já maior módulo de Bulk é do filme  $\text{Fe}_6\text{Cl}$  paramagnético, que é 125,9125GPa. Os cálculos do momento magnético apontam que os dois filmes finos têm magnetização razoável e próxima um do outro.

**Palavras-chave:** Filmes finos; energia de coesão; propriedades magnéticas.

\* Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões - URI Campus Santo Ângelo, Departamento de Ciências Exatas e da Terra, CEP 98802-470, Santo Ângelo-RS, Brasil.

 [tatypivoto@hotmail.com](mailto:tatypivoto@hotmail.com)

DOI: [10.21577/1984-6835.20170056](https://doi.org/10.21577/1984-6835.20170056)

## Cálculo de Energia de Formação, Energia de Coesão e Estrutura de Bandas dos Filmes Finos Fe<sub>6</sub>Ar e Fe<sub>6</sub>Cl

Tatiéli P. Anibele,\* Antônio Vanderlei dos Santos

Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões - URI Campus Santo Ângelo, Departamento de Ciências Exatas e da Terra, CEP 98802-470, Santo Ângelo-RS, Brasil.

\* [tatypivoto@hotmail.com](mailto:tatypivoto@hotmail.com)

*Recebido em 15 de julho de 2016. Aceito para publicação em 31 de março de 2017*

### 1. Introdução

### 2. Metodologia

#### 2.1. Método Computacional

### 3. Resultados e Discussão

#### 3.1. Propriedades Estruturais

#### 3.2. Estrutura de Bandas e Momento Magnético Total dos Filmes Finos

### 4. Conclusão

## 1. Introdução

Até meados do século XIX, o conhecimento existente acerca dos materiais era essencialmente empírico, ou na sua melhor forma, resultado de alquimia. Nos últimos anos, houve um grande interesse no estudo de multicamadas e filmes finos, e o desenvolvimento de técnicas experimentais avançou muito, proporcionando a construção mais rápida e com custos menores, desta nova classe de materiais. Desta forma, rumou-se ao domínio dos materiais, de seus processos de fabricação e transformação.<sup>1</sup>

A criação de novos materiais que possam atender as necessidades atuais, tanto do ponto de vista do desenvolvimento de novas tecnologias, como também para substituir outros na tentativa de baratear e melhorar as

suas aplicações, é uma busca constante.<sup>2,3</sup> Com o aumento da compreensão das propriedades fundamentais da matéria, principalmente através da física e química, foi possível sintetizar novos materiais e encontrar novas propriedades. São exemplos de novos materiais as multicamadas e os filmes finos.<sup>4,5</sup>

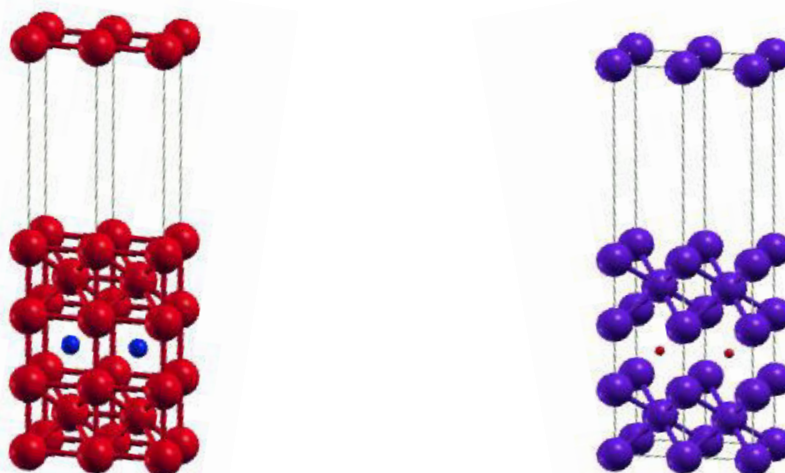
Muitos materiais empregados em dispositivos eletrônicos são fabricados na forma de filmes finos, isto é, camadas com espessuras que variam desde alguns angstroms ( $1\text{Å} = 1.10^{-10}\text{ m}$ ) até dezenas de microns ( $1\mu\text{m} = 1.10^{-6}\text{ m}$ ). Os filmes podem ser feitos com metais, isolantes, semicondutores ou supercondutores. Eles são usados em inúmeras aplicações, como capacitores, resistores, contatos metálicos em dispositivos semicondutores, camadas magnéticas em dispositivos de gravação, etc.<sup>6</sup>

Apesar do enorme progresso realizado pela ciência e pela engenharia de materiais nos últimos anos, ainda permanecem grandes desafios tecnológicos. Um deles é descrever teoricamente os filmes finos utilizando métodos de primeiros princípios, sendo essa a principal motivação do trabalho aqui apresentado. É necessário desenvolver materiais ainda mais sofisticados e especializados e, ao mesmo tempo, de menor custo. Do ponto de vista teórico, os cálculos de estrutura eletrônica aliados aos princípios da Física e da Química têm demonstrado grande importância na compreensão das propriedades do estado fundamental. Os cálculos de primeiros princípios pretendem prever, tanto de modo qualitativo quanto de modo quantitativo, a estrutura e as propriedades eletrônicas de sólidos.<sup>2</sup>

Algumas propriedades físico-químicas dos sólidos são demonstradas nesse trabalho, como os cálculos de energia de formação, que demonstram a energia necessária para formar o composto. Já os cálculos de energia de coesão exibem a estabilidade do material, e desta forma, é possível encontrar o volume de equilíbrio. O módulo de Bulk mostra a resistência do composto à compressão

uniforme e é obtido através da derivada segunda da energia total em função do volume, vezes o volume de equilíbrio obtido através da energia de coesão. As propriedades magnéticas são propriedades que demonstram a magnetização fora do núcleo do material, tendo como principais atuantes os elétrons que estão fora do mesmo. Neste trabalho não serão levadas em conta as propriedades hiperfinas, que são as propriedades magnéticas encontradas dentro do núcleo.

Nesse estudo, foram determinadas as propriedades dos filmes finos,  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  e  $\text{Fe}_6\text{Cl}$ , a fim de descobrir se esses filmes podem ter propriedades satisfatórias para serem usados em aplicações industriais. As estruturas cristalinas utilizadas para os cálculos da estrutura eletrônica dos filmes finos são mostradas na Figura 1, sendo que as estruturas são formadas por duas camadas de Ferro BCC (Body Centered Cubic) e uma camada de Argônio ou Cloro. Na figura (a), os átomos vermelhos representam os Ferros e os átomos azuis, os Argônios, e na figura (b), os átomos roxos representam os Ferros e os átomos vermelhos, os Cloros.



**Figura 1.** Estruturas cristalinas utilizadas para os cálculos da estrutura eletrônica dos filmes finos (a) - Estrutura do  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  e (b) – Estrutura do  $\text{Fe}_6\text{Cl}$

A principal motivação desse trabalho está relacionada ao desenvolvimento tecnológico e à procura de novos materiais que possam ser aplicados na microeletrônica e nano eletrônica, sendo que o interesse está voltado à sintetização de novos materiais, mas com baixo custo. Sabendo disso, foram calculadas as propriedades dos filmes  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  e  $\text{Fe}_6\text{Cl}$ , com enfoque nas propriedades magnéticas, tendo em vista, o cálculo das estruturas de bandas dos compostos. Para fins de comparação das estruturas de bandas, obtiveram-se as bandas para os filmes nos estados ferromagnéticos e paramagnéticos.

Na seção a seguir serão comentados alguns aspectos da teoria de primeiros princípios, que, por meio da simulação computacional, leva à observação de estados eletrônicos. Logo após, serão mostrados os resultados obtidos.

## 2. Metodologia

### 2.1. Método Computacional

Os cálculos são baseados na teoria do funcional da densidade (Density Functional Theory - DFT) com aproximação generalizada gradiente (Generalized Gradient Approximation - GGA) e potencial de correlação de câmbio. O método utilizado é o LAPW ((Linearized Augmented Plane Waves), que é uma modificação APW (Augmented Plane Method), inserido de código computacional Wien2k.<sup>7</sup>

A DFT,<sup>8</sup> é uma teoria para obtenção das propriedades do estado fundamental de sistemas multieletrônicos. Essa teoria vem se tornando um método muito popular e útil para tratar a matéria (átomos, moléculas e sólidos), como no cálculo de ligações químicas e em cálculos de estrutura eletrônica e de estrutura de bandas na física do estado sólido. Na prática, ela é usada através de métodos de cálculo de estrutura eletrônica. Esses métodos, como o LAPW, por

exemplo, são implementados em complexos códigos computacionais e através destes, é possível a realização de cálculos de propriedades microscópicas dos sólidos.<sup>9</sup>

O código computacional Wien2k possui várias parametrizações de cálculo, sendo que neste trabalho utilizou-se a parametrização Perdew-Burke-Ernzerhof de 1996 (PBE 96).<sup>10</sup> Essa parametrização é um aperfeiçoamento da LSDA (Local Spin Density Approximation). O PBE 96 foi construído de modo a preservar as características corretas do LSDA e adicionar outras propriedades formais. É o GGA mais utilizado para cálculos de química quântica atualmente e, esta correlação é dada em termos de energia de correlação do gás de elétrons. É um dos únicos funcionais a implementar um vínculo em sua forma funcional, através da fixação de um de seus parâmetros.

Para o cálculo de primeiros princípios, não se utiliza dados experimentais, assim, o parâmetro de rede inicial do filme fino  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  foi definido através da média aritmética entre os parâmetros de rede do argônio e ferro e, como o cloro e o argônio diferem apenas por um elétron, repetiu-se esse valor para o cálculo do  $\text{Fe}_6\text{Cl}$ . Primeiramente, calculou-se a energia total em função do volume da célula unitária, do ferro, do argônio e do cloro, em sua forma Bulk. Foram realizados cálculos variando-se os parâmetros de rede de 2% a cada passo no Wien2k, assim, obteve-se a energia total em função do volume para a estrutura Bulk e para a estrutura de filme fino. Desta forma, utilizando a equação de energia de coesão, discutida a seguir, foi encontrado o volume de equilíbrio dos filmes finos, e através deste foi possível descobrir o parâmetro de rede do equilíbrio ( $a_{0EQ}$ ). Utilizou-se o  $a_{0EQ}$  para calcular as propriedades magnéticas desejadas.

## 3. Resultados e Discussão

Inicia-se a discussão salientando que para

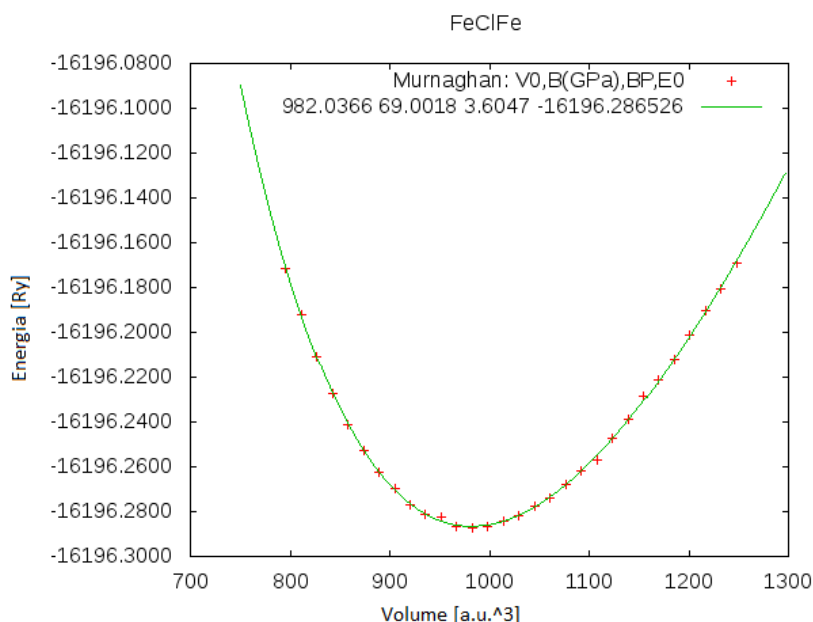
os cálculos que foram realizados na fase ferromagnética utilizaram-se duas direções de spin, enquanto nos cálculos da fase não-magnética utilizou-se apenas uma direção de spin.

### 3.1. Propriedades Estruturais

De acordo com a metodologia explicada anteriormente, o Wien2k fornece um gráfico da energia total *versus* volume, juntamente com os valores de todos os pontos para a sua

confeção. Como exemplo, o gráfico do Fe<sub>6</sub>Cl pode ser visualizado na Figura 2.

Através da análise desses gráficos foi possível obter algumas propriedades, como por exemplo, o volume de equilíbrio ( $V_0$ ), o módulo de Bulk ( $B$ ) e a energia total do equilíbrio ( $E_0$ ) que é dada pelo ponto mínimo da energia de coesão do gráfico. Esse ponto mínimo da curva foi obtido através da derivada do polinômio da curva, e então, colocado no software Microsoft Mathematics para encontrar sua raiz.



**Figura 2.** Gráfico obtido através do Wien2k, o qual mostra a Energia Total em função do Volume

Porém, essa energia total, que é o somatório de energia de todos os átomos da estrutura, não fornece o quão estável é o material, e para isso é necessário calcular a energia de coesão,<sup>11</sup> que é resultado da subtração da energia total e das energias dos átomos livres. Em outras palavras, a energia de coesão é a energia necessária para desmontar o composto, e é dada pela Equação 1:

$$E_C = E_{tot} - \sum_n E_{ix}^{átomo} \quad \text{Eq. 1}$$

Sendo:

$E_C$  = Energia de Coesão;

$E_{tot}$  = Energia Total;

$E_{ix}^{átomo}$  = Energia dos átomos livres.

Os resultados para as propriedades estruturais dos compostos Fe<sub>6</sub>Ar e Fe<sub>6</sub>Cl foram resumidos na Tabela 1. Para fins de comparação, obtiveram-se as propriedades dos filmes finos estudados, na fase paramagnética.

**Tabela 1.** Propriedades Estruturais dos filmes finos estudados nas fases ferromagnéticas e não-magnéticas

	Fe <sub>6</sub> Ar (FM)	Fe <sub>6</sub> Ar (FNM)	Fe <sub>6</sub> Cl (FM)	Fe <sub>6</sub> Cl (FNM)
<b>Volume de Equilíbrio (V<sub>0</sub>)</b>	1001,3820	890,8445	982,0336	854,2259
<b>Módulo de Bulk (B)</b>	52,5748	110,7776	69,0018	125,9125
<b>Energia Total (E<sub>0</sub>)</b>	-16331,3151	-16331,0773	-16196,2865	-16196,0351
<b>Energia de Coesão (E<sub>c</sub>)</b>	-2,060	-1,816	-2,600	-2,350
<b>Energia de Formação (E<sub>f</sub>)</b>	0,6760	0	0,197	0

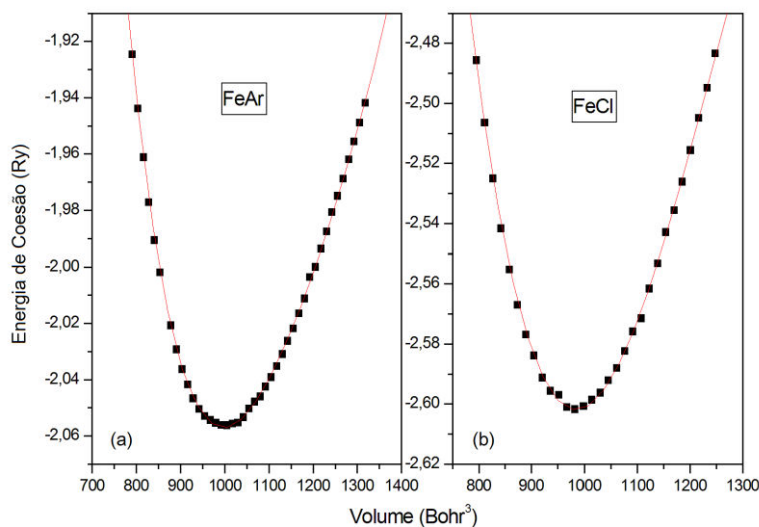
(FM)- fase ferromagnética/ (FNM) – Fase paramagnética/ (V<sub>0</sub>) – Ångstrons<sup>3</sup> – a<sup>3</sup>/ (B) – Giga Pascal - GPa/ (E<sub>0</sub>)- Rydberger – Ry/ E<sub>c</sub>- Rydberger- Ry/ E<sub>f</sub> – Rydberger – Ry

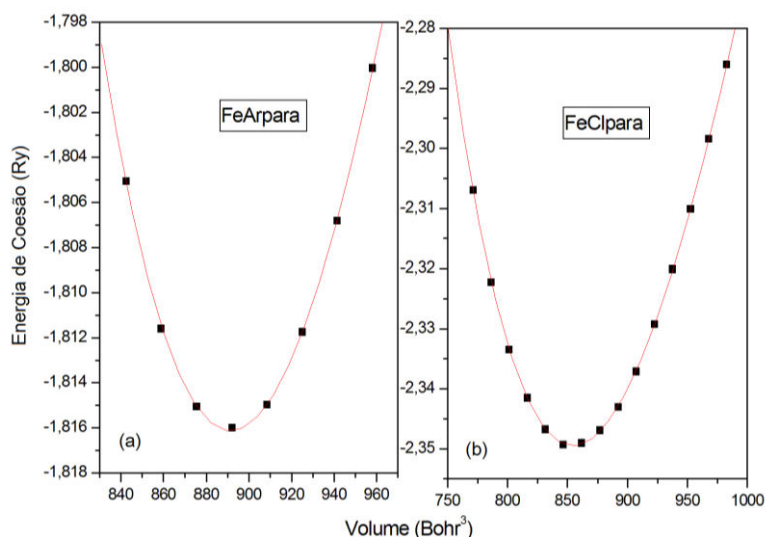
Analisando a Tabela 1, é possível verificar que todos os filmes possuem energia de coesão negativa, o que define que todas as estruturas são viáveis. A energia de coesão encontrada para os filmes Fe<sub>6</sub>Ar e Fe<sub>6</sub>Cl, respectivamente, foram de -2,06 Ry e -2,60 Ry.

O filme mais estável é o Fe<sub>6</sub>Cl, seguido do Fe<sub>6</sub>Cl paramagnético. Percebe-se que os

filmes que contêm cloro são mais estáveis que os filmes que contêm argônio e essa menor estabilidade do argônio deve-se ao fato de este pertencer ao grupo dos gases nobres, os quais apresentam propriedades diferentes do restante dos átomos da tabela periódica.

Isso pode ser melhor visualizado nas Figuras 3 e 4, a seguir:

**Figura 3.** Energia de coesão dos filmes finos em função do volume, na fase ferromagnética (a) Fe<sub>6</sub>Ar e (b) Fe<sub>6</sub>Cl



**Figura 4.** Energia de coesão dos filmes finos em função do volume, na fase paramagnética (a) Fe<sub>6</sub>Ar e (b) Fe<sub>6</sub>Cl

A energia de formação é a energia necessária para colocar os átomos no arranjo cristalino desejado, ou seja, é a energia utilizada para construir esse composto.<sup>11</sup> De uma forma geral, a energia de formação (ou entalpia de formação) é calculada pela Equação 2. Se os valores de energia de formação são positivos, significa que os compostos não se formam espontaneamente, ou seja, necessitam de oferecimento de energia para serem formados.

$$E_F = E_{tot} - \sum E_x^i \quad \text{Eq. 2}$$

Sendo:

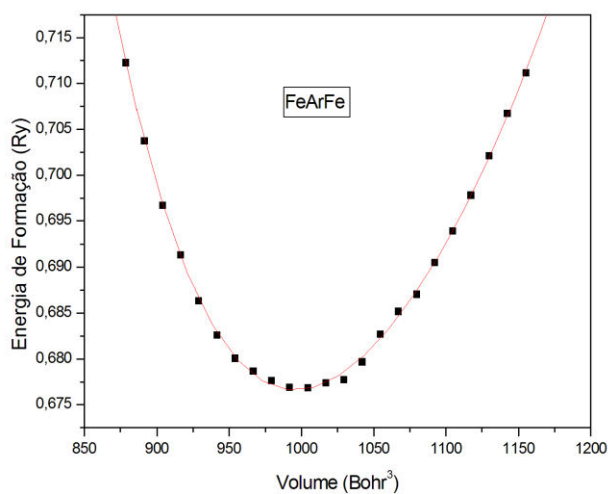
$E_F$  = Energia de formação;

$E_{tot}$  = Energia total;

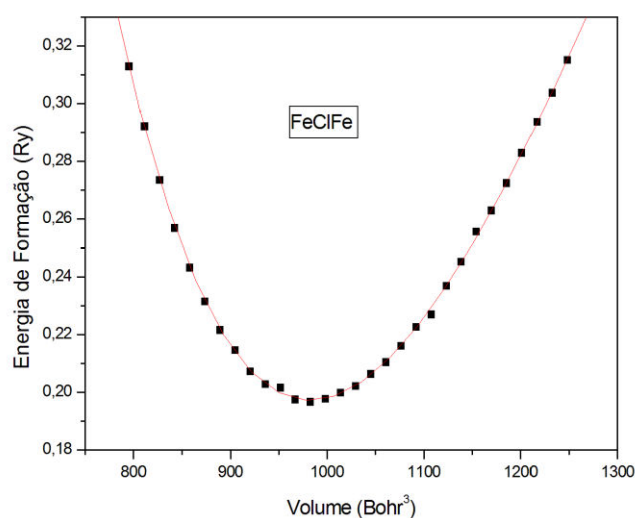
$E_x^i$  = Energia cristalina de cada átomo na sua estrutura do estado puro na situação de equilíbrio a zero Kelvin e zero Pascal.

Na energia de formação, calculou-se apenas a energia dos filmes na fase ferromagnética. Os gráficos da energia de formação dos filmes são mostrados nas Figuras 5 e 6.

Ainda observando a Tabela 1, tem-se o módulo de Bulk, que é o módulo de compressibilidade do material, ou seja, uma propriedade que mostra a resistência que o material possui à compressão uniforme, quando cargas de mesmo valor são aplicadas uniformemente em todas as superfícies do material. O menor módulo de bulk, dentre os compostos estudados é o do filme Fe<sub>6</sub>Ar, 52,5748 GPa. Este filme possui a menor resistência à compressão devido ao fato de possuir o maior volume (1001,3820 a<sup>3</sup>) e seus átomos estão mais espaçados. Pode-se analisar que o maior módulo de bulk é do filme Fe<sub>6</sub>Cl paramagnético, o qual possui o menor volume e consequentemente, tem ligações mais unidas e mais fortes, por isso, maior a resistência à compressão.



**Figura 5.** Energia de formação x Volume do filme Fe<sub>6</sub>Ar, na fase ferromagnética



**Figura 6.** Energia de formação x Volume do filme Fe<sub>6</sub>Cl, na fase ferromagnética

Após a análise desses resultados, foram calculadas as propriedades no equilíbrio, que demonstram as propriedades no núcleo dos átomos. Inicialmente, encontrou-se o parâmetro de rede no equilíbrio, o qual é dado pela Equação 3:

$$V = a_{0EQ}^3 \quad \text{Eq. 3}$$

Sendo:

$a_{0EQ}$  = parâmetro de rede no equilíbrio;

$V$  = volume de equilíbrio.

Extraíndo a raiz cúbica do volume total, encontrou-se o parâmetro de rede no equilíbrio. Esses novos parâmetros foram inseridos outra vez na interface do código computacional Wien2k e iniciaram-se os cálculos para, então, encontrar as propriedades magnéticas desejadas.



### 3.2. Estrutura de Bandas e Momento Magnético Total dos Filmes Finos

Dentre todas as propriedades magnéticas dos materiais, será dado ênfase, neste estudo, à estrutura de bandas e ao momento magnético dos filmes finos.

A proximidade dos átomos nos sólidos faz com que seus elétrons ocasionem uma perturbação nos átomos vizinhos. Essa influência é tal que resulta na divisão do estado eletrônico em uma série de estados eletrônicos espaçados entre si para formar o que se chama de Banda de Energia Eletrônica. As bandas dependem da distância interatômica e existem bandas de condução e bandas preenchidas de elétrons (bandas de valência).

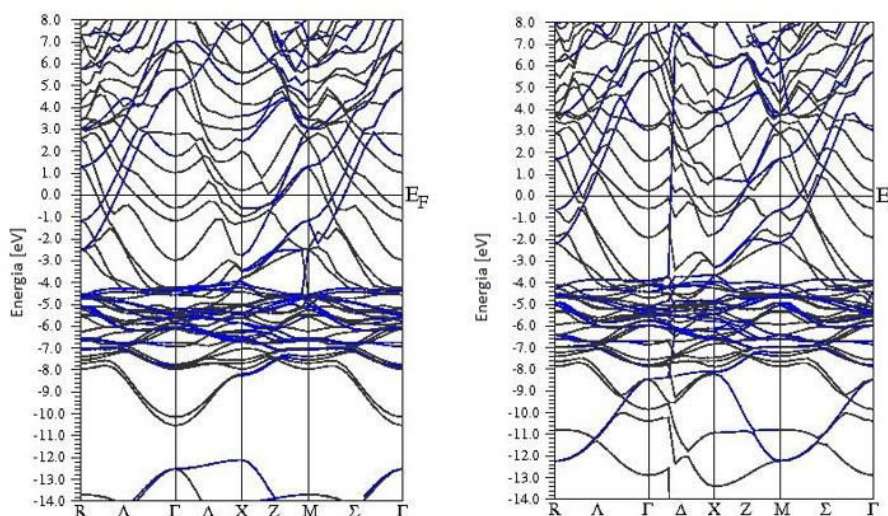
Nos materiais condutores, os elétrons preenchem todos os estados possíveis da banda de valência e como não há espaçamento entre a banda de valência e a banda de condução, pouca energia é requerida para excitar um grande número de elétrons e devido a isso, possuem alta condutividade. Nos materiais semicondutores, o espaçamento entre as bandas de valência e condução é pequeno, porém suficiente para excitar menos elétrons do que nos materiais condutores. Já nos materiais isolantes, o espaçamento entre as

bandas de valência e de condução é consideravelmente grande, o que dificulta a transferência dos elétrons para gerar condução.<sup>11</sup>

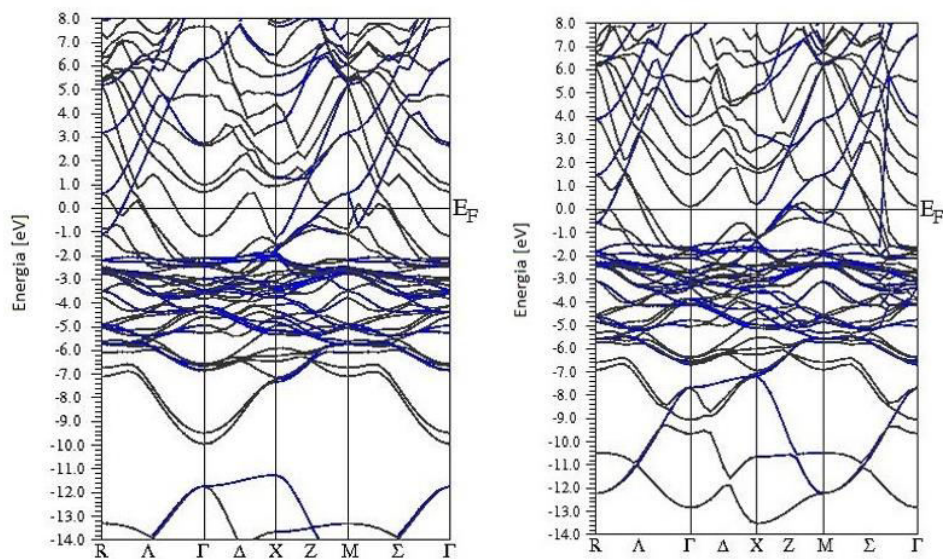
Na física do estado sólido, a estrutura eletrônica de bandas, ou simplesmente estrutura de bandas, refere-se à forma da relação entre a energia e o momento de um elétron em um cristal. A característica mais importante desta relação de dispersão em cristais é que existem intervalos de energia não permitidos para o elétron.<sup>12</sup> Isto é, se você pudesse observar a energia de todos os elétrons em um cristal e as marcasse em uma linha, você observaria que certas faixas de valores não estariam presentes. Estas faixas de energia desaparecidas são chamadas de *gaps* de energia e tem origem na interferência entre as funções de onda eletrônicas, seus spins e a periodicidade do cristal.

Nesse estudo, calcularam-se as estruturas de bandas dos filmes finos na fase ferromagnética e, para fins de comparação, também foram calculadas as estruturas de bandas no estado paramagnético.

Na Figura 7, são mostradas as estruturas de bandas dos compostos  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  do  $\text{Fe}_6\text{Cl}$ . Já na Figura 8, são mostradas as estruturas de bandas dos compostos  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  paramagnético do  $\text{Fe}_6\text{Cl}$  paramagnético.



**Figura 7.** Estrutura de bandas dos compostos  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  e do  $\text{Fe}_6\text{Cl}$  na fase ferromagnética



**Figura 8.** Estrutura de bandas do  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  e do  $\text{Fe}_6\text{Cl}$  na fase paramagnética

Na Figura 7 é possível perceber que há maior probabilidade de ter um elétron entre -5 Ry e -7 Ry. Também é possível perceber que o elétron está em uma camada mais distante da energia de Fermi, quando comparado com a Figura 8, dos filmes paramagnéticos, onde a probabilidade de encontrar o elétron está entre as energias -2 Ry e -4 Ry. Na estrutura de bandas do  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  há maiores gaps de energia do que no do  $\text{Fe}_6\text{Cl}$ , abaixo da energia de Fermi. Na estrutura de bandas do  $\text{Fe}_6\text{Ar}$  é possível perceber que há maiores gaps de energia nas arestas do cubo, ou seja, no M e no R, já na estrutura de bandas do  $\text{Fe}_6\text{Cl}$  os gaps de energia são menores, também abaixo da energia de Fermi também.

Somente os elétrons que estão acima da energia de Fermi, que são os chamados elétrons livres, podem ser excitados e podem conduzir energia. Analisando as estruturas, percebe-se que todos os filmes são altamente condutores, pois não há nenhum gap de energia contínuo acima da energia de

Fermi, mesmo nas fases paramagnéticas. Se houvesse um pequeno gap de energia contínuo acima da energia de Fermi, o material seria semicondutor. E se houvesse um grande gap de energia acima da energia de Fermi, o material seria isolante.

Pode-se notar que a principal diferença entre o estado paramagnético e o ferromagnético é que nos estados paramagnéticos a maioria dos estados abaixo da energia de Fermi estão mais próximos da mesma. Já os estados ferromagnéticos possuem suas bandas de energia mais baixas que a energia de Fermi, mostrando um distanciamento superior quando comparado com o estado paramagnético.

Para complementar o entendimento de algumas propriedades magnéticas dos filmes finos, foi necessário encontrar o momento magnético, sendo que este foi definido como o número de elétrons de spin up menos spin down, abaixo da energia de Fermi. Os resultados encontrados são mostrados na Tabela 2.

**Tabela 2.** Momento magnético total por célula unitária dos filmes finos Fe<sub>6</sub>Ar e Fe<sub>6</sub>Cl, na fase ferromagnética

	Fe <sub>6</sub> Ar	Fe <sub>6</sub> Cl
<b>Up Total (é)</b>	91,3811	90,8416
<b>Down Total (é)</b>	75,1197	74,3456
<b>Momento Magnético (μ<sub>B</sub>)</b>	16,2614	16,4960

Nota-se que o momento magnético total dos dois filmes finos, na fase ferromagnética, é apreciável, visto que em comparação com multicamadas já estudadas,<sup>11</sup> o momento magnético dos filmes finos é menor por célula unitária que multicamadas de Ferro-Oxigênio e maior que multicamadas Ferro-Nitrogênio. Isso mostra que os filmes finos de Fe<sub>6</sub>Ar e Fe<sub>6</sub>Cl possuem propriedades magnéticas satisfatórias, que tem potencial para serem usadas como material de gravação.

#### 4. Conclusão

A pesquisa de novos materiais que possam ser utilizados em aplicações práticas necessita, também, da discussão teórica e, para tanto, neste trabalho, foi possível tecer algumas conclusões: notou-se que os dois filmes possuem energia de coesão negativa, o que define que todas as estruturas são estáveis. Percebeu-se que os filmes que contêm cloro são mais estáveis que os filmes que contêm argônio e essa menor estabilidade do argônio é explicada pelo fato que este pertence ao grupo dos gases nobres, os quais apresentam propriedades diferentes do restante dos átomos da tabela periódica, o que dificulta a formação de compostos.

Quanto à energia de formação, pode-se concluir que os dois filmes finos, possuem energia de formação positiva, o que demonstra que se deve fornecer energia para sua formação. Os filmes finos que têm maior

facilidade de serem formados são os estados paramagnéticos dos dois filmes estudados. Conclui-se também que o módulo de Bulk do filme fino Fe<sub>6</sub>Ar, é o menor, com 52,5748 GPa. Este filme possui a menor resistência à compressão devido ao fato que possui o maior volume e seus átomos estão mais espaçados. Pode-se analisar que o maior módulo de Bulk é do filme Fe<sub>6</sub>Cl paramagnético, o qual possui o menor volume e conseqüentemente, as ligações estão mais unidas e mais fortes, por isso, maior a resistência à compressão.

Além disso, verifica-se que a principal diferença entre o estado paramagnético e o ferromagnético é que nos estados paramagnéticos a maioria dos estados abaixo da energia de Fermi estão próximos da mesma. Já os estados ferromagnéticos possuem suas bandas de energia mais baixas que a energia de Fermi, mostrando um distanciamento superior ao estado paramagnético. Os cálculos do momento magnético apontam que os dois filmes finos têm magnetização razoável e próxima um do outro.

#### Referências Bibliográficas

<sup>1</sup> Klein, A.; Fredel, M. C.; Wendhausen, P. Novos Materiais: Realidade e tendências de desenvolvimento, *Ministério do Desenvolvimento, Indústria e Comércio Exterior* 2008. [\[Link\]](#)

<sup>2</sup> Floriano, E. A.; Scalvi, L. V.; Sambrano, J. R. Determinação de diagramas de bandas de

energia e da borda de absorção em SnO<sub>2</sub>, depositado via sol-gel, sobre quartzo. *Revista Cerâmica* **2009**, *55*, 88. [CrossRef]

<sup>3</sup> Staudt, P.; *Tese de doutorado*, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2010. [Link]

<sup>4</sup> Crippa, A.; Sydenstriker, T.; Amico, S. Desempenho de Filmes Multicamadas em Embalagens Termoformadas. *Revista Polímeros: Ciência e Tecnologia* **2007**, *17*, 188. [CrossRef]

<sup>5</sup> Hahn, S. Os papéis da ciência dos materiais e da engenharia para uma sociedade sustentável. *Revista Estudos Avançados* **1994**, *8*, 36. [CrossRef]

<sup>6</sup> Rezende, S.; *Materiais e dispositivos eletrônicos*. São Paulo: Livraria da Física, 2004.

<sup>7</sup> Wien2k. Disponível em: <<http://www.wien2k.at>>. Acessado em: 11 julho 2015.

<sup>8</sup> Hohenberg, P.; Kohn, W. Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review* **1964**, *136*, B864. [CrossRef]

<sup>9</sup> dos Santos, A. V.; *Dissertação de Mestrado*, Universidade Federal de Santa Catarina, 1993. [Link]

<sup>10</sup> Perdew, J.; Burke, K.; Ernzerhof, M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letter* **1977**, *77*, 3865. [CrossRef]

<sup>11</sup> dos Santos, A. V. Consequences on the electronic structure and hyperfine of iridium-iron alloys when transformed into substituted iron iridium nitrides. *Journal of Materials Research* **2014**, *29*, 959. [CrossRef]

<sup>12</sup> de Lázaro, S. R.; Longo, E.; Beltran, A.; Sambrano, R. Propriedades eletrônicas e estruturais do PbTiO<sub>3</sub>: Teoria do funcional de densidade aplicada a modelos periódicos. *Química Nova* **2005**, *28*, 10. [CrossRef]