

Estudo através de cálculos teóricos das propriedades eletrônicas e magnéticas de nitretos substituídos γ' -Fe_{4-x}M_xN, M= Be, Li, Sm ou Gd.

Danielli J. Gonsiorkiewicz¹(IC), João Carlos Krause^{1*}(PQ) *Krause@santoangelo.uri.br

Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões (URI) – campus de Santo Ângelo – RS¹

Palavras Chave: nitretos de ferro substituídos, LAPW, propriedades eletrônicas

Introdução

As pesquisas em novos compostos vêm aumentando, em função da procura por novos materiais que possam ser utilizados nas mais diversas áreas da indústria. Os cálculos teóricos de estrutura eletrônica encontram-se dentro da área de pesquisas teóricas de materiais sendo bastante interessantes, pois permitem investigar as propriedades de compostos já existentes observando em que novas áreas poderiam ser aplicados, bem como analisar propriedades de novos compostos de modo a verificar se é possível e viável obtê-los experimentalmente. Os cálculos são gerados através de um software, sendo o WIEN2k um dos programas utilizados. Sabendo das interessantes propriedades apresentadas por nitretos de ferro substituídos, neste projeto, pretendeu-se investigar as propriedades eletrônicas e magnéticas de novos nitretos de ferro substituídos com átomos de berílio, lítio, samário ou gadolínio.

Resultados e Discussão

Inicialmente foram realizados cálculos para o nitreto de ferro puro (Fe₄N) e, a partir do parâmetro de rede encontrado para esse composto foram realizados os cálculos para os compostos analisados: BeFe₃N, LiFe₃N, SmFe₃N e GdFe₃N. O espaço de grupo utilizado foi Pm-3m (célula cúbica), os novos átomos, foram inseridos no córner, posição (0,0,0) na estrutura perovskita. Então, foram realizados os cálculos de estabilidade, propriedades magnéticas, densidade eletrônica e densidade de estados para os compostos. Posteriormente foram realizados cálculos para os elementos puros a fim de investigar a estabilidade dos novos compostos.

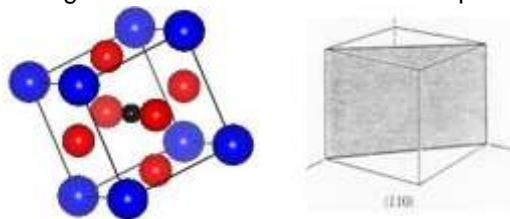


Figura 1: Célula unitária dos compostos e corte no plano (110).

Os parâmetros de rede obtidos foram: 3,8033 Å para Fe₄N, 3,6981 Å para o BeFe₃N e 3,7872 Å para o LiFe₃N, 4,23 Å para o SmFe₃N e

4,02 para o GdFe₃N. Os resultados obtidos para a densidades de estados demonstraram, para todos os compostos analisados, fortes interações ocorrendo entre os orbitais *d* dos átomos de ferro com os orbitais *s* do átomo de nitrogênio. Em relação aos novos elementos inseridos os compostos com substituintes berílio e lítio não demonstraram fortes interações, destes elementos, com os outros dois pertencentes a cada composto. Já os compostos com substituinte samário ou gadolínio demonstraram interações em seus orbitais *s* e *p* com os outros dois elementos.

Em relação ao momento magnético total foram obtidos os seguintes resultados: o Fe₄N apresentou um valor total de 10,41452 μ_B , o BeFe₃N 4,6824 μ_B , o LiFe₃N 7,30296 μ_B , o SmFe₃N -1.06551 μ_B e o GdFe₃N um valor de 7.44148 μ_B . Sendo que os resultados obtidos para o composto com samário demonstraram que este apresenta comportamento antiferromagnético. Por fim, foi analisada a estabilidade dos compostos, através da energia mínima de formação. Os resultados obtidos foram: -4953,045627 Ry para BeFe₃N, -4982,574987 Ry para LiFe₃N, -4982,61181 Ry para SmFe₃N e -4982,55352 Ry para GdFe₃N. Sendo que para o nitreto de ferro puro a energia mínima de formação foi de -7528,190236 Ry.

Conclusões

Em relação ao parâmetro de rede obtido, observou-se que com a inserção dos elementos berílio ou lítio o parâmetro diminuiu, já com a inserção dos elementos samário e gadolínio teve um aumento, em relação ao nitreto de ferro puro, o que pode ser explicado pelo tamanho dos elementos inseridos. Observou-se também que quando compostos alcalinos são adicionados, estes, não apresentam significativa interação com os elementos ferro e nitrogênio, porém quando se utilizam elementos lantanídeos, estes, apresentam interações com os outros elementos pertencentes ao composto. Em relação a estabilidade, todos mostraram-se estáveis, porém menos estáveis que o nitreto de ferro puro.

¹Y.Q. Wu, M.F. Electronic structure and properties of (Fe_{1-x}Ni_x)₄N (0 ≤ x ≤ 1.0). Journal of Physica B, Volume 405, 2010, Pages 2700-2705.

²C. Paduani. Electronic structure of the perovskite-type nitride RuFe₃N. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Volume 278, Issues 1–2, July 2004, Pages 231-236.