Propriedades estruturais, eletrônicas e magnéticas do FeO – Uma abordagem via DFT+U

D. Rivera[†1], L. H. Lima[1], A. Champi[1], P. Venezuela[2], L. Barreto[‡1]
[1] *Universidade Federal do ABC*, [2] *Universidade Federal Fluminense*
[†]*ddmrferreira@gmail.com*, [‡]*lucas.barreto@ufabc.edu.br*

A oxidação é um fenômeno de interesse tecnológico e de engenharia, e sua compreensão passa pela física da matéria condensada. Os óxidos de metais de transição se comportam como isolantes de Mott, material este que apresenta um band-gap o qual não é causado pela ocupação das bandas, mas sim pela forte interação de correlação coulombiana elétron-elétron. Sendo assim, seu estudo apenas via teoria do funcional da densidade (DFT) é insuficiente já que a teoria leva em conta a interação de um campo médio efetivo causado pela densidade eletrônica em elétrons individuais, além de exigir funções de onda com gradiente baixo, ou estados não localizados. Dessa forma, correções baseadas em hamiltonianas modelo as quais contam estados localizados, como a de Hubbard, são necessárias. Nesse trabalho, a aplicação da DFT+U (DFT + modelo de Hubbard) para a descrição do FeO visou obter os principais resultados experimentais de bulk e da superfície (111). A escolha da superfície é justificada pela orientação [111] dos spins nos átomos de Ferro além do crescente interesse prático nessa superfície. O software aberto Quantum ESPRESSO foi utilizado no presente trabalho. O modelo proposto previu que a configuração magnética do estado fundamental de bulk é a antiferromagnética, concordando com a literatura. Além disso, as propriedades estruturais, eletrônicas e magnéticas de bulk foram recriadas. O estado fundamental da superfície (111) previsto pelo modelo desenvolvido também foi de configuração antiferromagnética, e os estados da superfície se mostraram metálicos.