

PROPRIEDADE MAGNÉTICAS EM MATERIAIS E NANO-PARTÍCULAS

Wesley Vilela Dos Santos (wesley.vilela.dos.santos@hotmail.com)

Giovani Faccin (giovaniFaccin@ufgd.edu.br)

A simulação computacional é uma ferramenta que possibilita a realização de experimentos virtuais, os quais nos permitem inferir o comportamento da natureza a partir das leis físicas conhecidas e, a partir disso, realizar experimentos reais, na maioria dos casos, e compará-los com a simulação virtual, a fim de obter resultados convergentes. O objetivo do trabalho foi o estudo e compreensão de métodos e modelos computacionais pertinentes à simulação computacional de materiais magnéticos. No trabalho desenvolvido foram usados métodos computacionais baseados em modelos de spins para a descrição de propriedades magnéticas de materiais. Inicialmente houve um estudo dirigido de programação na linguagem C++, para compreensão do método de Monte Carlo e, a partir desse, a produção de um software na linguagem estudada que estimasse o valor de p por meio do método de Monte Carlo. Em seguida, houve o estudo dirigido do modelo de Ising 1D e, posteriormente, utilizamos novamente o método de Monte Carlo para a construção do Modelo de Ising 2D, obtendo uma série de propriedades magnéticas do material ideal simulado no programa construído. Subsequentemente, foram feitas simulações de nanopartículas e de sólidos macroscópicos de ferro por meio do modelo Hamiltoniano de Spin, com auxílio do software Vampire, em que foi possível a obtenção de parâmetros para os arranjos supracitados. O cálculo do valor de p rendeu resultados próximos do valor real com 4 casas após a virgula, já o Modelo de Ising 2D apresentou resultados que foram compatíveis com aqueles encontrados no livro “Computational Physics” usado como guia. Os resultados apresentados pelo programa Vampire com o modelo Hamiltoniano de Spin se mostraram convergentes com aqueles encontrados na literatura científica. Assim, o trabalho realizado pôde contribuir efetivamente para a formação do estudante, bem como para a formação de futuros leitores do trabalho, o qual apresenta um compilado de modelos e técnicas relevantes para a simulação computacional de materiais magnéticos.

Palavras-chave: Simulação computacional. Monte Carlo. Modelo de Ising. Modelo Hamiltoniano.