



CBPF

Centro Brasileiro
de Pesquisas Físicas

UNIDADE DE PESQUISA DO MCTI



XIX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica

Universidade Federal Fluminense

20 a 23 de outubro de 2025 - Niterói - RJ

Estrutura eletrônica e magnetismo: do ab initio ao semi-clássico

XIX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica - Niterói, RJ

Ramon Cardias Alves de Almeida
ramon.cardias@cbpf.br

October 23, 2025

Conteúdo

1 Introdução

2 Motivação

3 Teoria: DFT e Modelo de Heisenberg

4 Aplicações

5 Agradecimentos

Conteúdo

1 Introdução

2 Motivação

3 Teoria: DFT e Modelo de Heisenberg

4 Aplicações

5 Agradecimentos

Colaboradores

Brasil 

- Ângela Klautau (UFPA)
- Roberto Bechara Muniz (UFF)
- Márcio Costa (UFF)
- Flávio Garcia (CBPF)
- Luiz Sampaio (CBPF)
- Tatiana Rappoport (CBPF)

França 

- Cyrille Barretau (CEA - CNRS)
- Pascal Thibaudeau (CEA - CNRS)

Suécia 

- Olle Eriksson (Uppsala University)
- Anna Delin (KTH)
- Anders Bergman (Uppsala University)
- Danny Thonig (Örebro University)
- Lars Nordström (Uppsala University)

Colaboradores Suécia



Figure: Reunião do grupo em Estolcomo.

Colaboradores Brasil



Figure: Visita do Anders a UFF.

Ultima visita



Figure: Visita do Anders e Lars ao RJ.

Uma anedota sobre física básica

Conteúdo

1 Introdução

2 Motivação

3 Teoria: DFT e Modelo de Heisenberg

4 Aplicações

5 Agradecimentos

Contexto científico



Figure: Quipu. Método de comunicação entre os Incas.

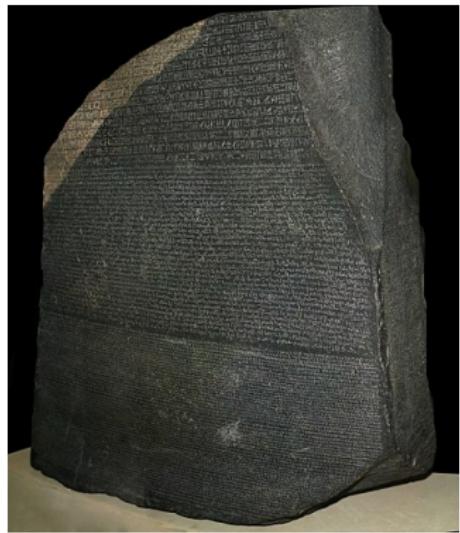


Figure: Rosetta stone atualmente no museu Britânico.

Há muito tempo mantemos a necessidade de armazenados e se comunicar através deles.

Contexto científico

In 2018, o total de dados armazenados em diversas tipos de mídia totalizava 33 zettabytes (ZB). A estimativa é que alcancemos 175 ZB em 2025. 1 ZB corresponde a 1 bilhão de terabytes.

- Exemplo 1: Skyrmins
- Textura magnética topologicamente protegida

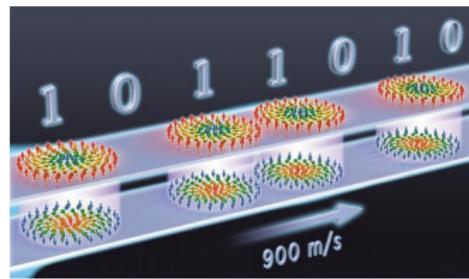


Figure: Skyrmins
antiferromagnéticos - Science 384,
6693 (2024)

- Exemplo 2: MRAM via spin-orbit torque (SOT) ou spin-transfer torque (STT).

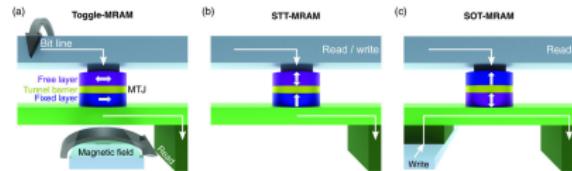


Figure: Representação esquemática de Magnetoresistive Random Access Memory (MRAM) - Adv. Intell. Syst. 4, 2200068 (2022)

Motivação: MRAM

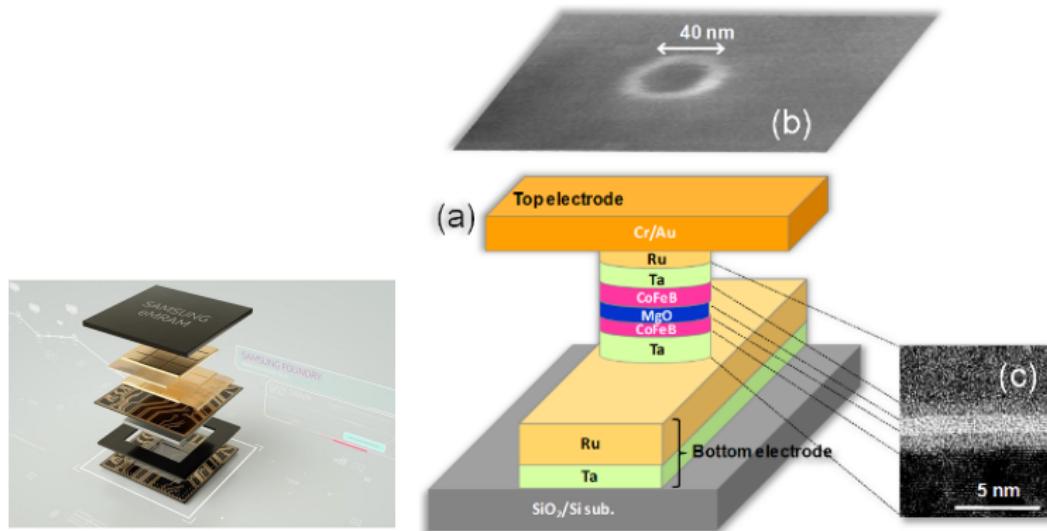


Figure: MRAM Samsung

Motivação: MRAM

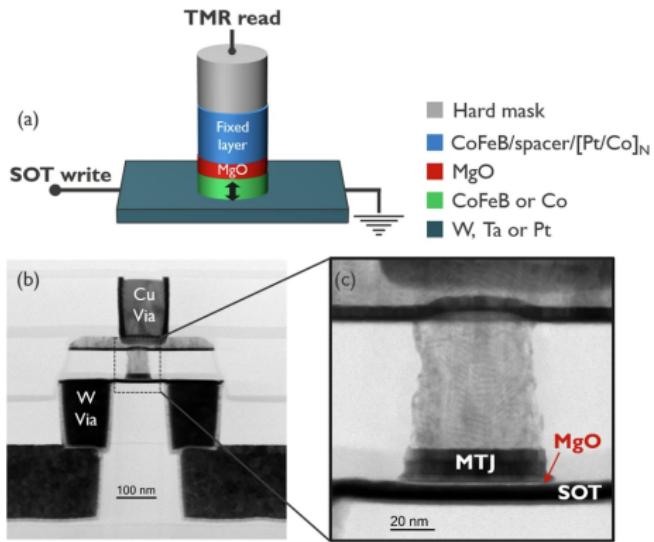


Figure: Referência: npj Spintronics volume 2, Article number: 48 (2024). Recent progress in spin-orbit torque magnetic random-access memory

Principais Empresas em MRAM (STT e SOT)

Empresa	Atuação	Destaques recentes
Samsung Electronics	Semicondutores memórias	eMRAM já em produção; planos para nós de 5 nm e uso em IA/automotivo.
Everspin Technologies	Fabricante dedicada a MRAM	Produção em volume de STT-MRAM (até 256 Mb) para data centers e IoT.
IMEC	P&D e prototipagem	Protótipos de SOT-MRAM com recorde de baixa energia, prontos para integração.
Antaios	Startup SOT-MRAM	Pioneira em SOT-MRAM; captação superior a US\$ 10 mi para escalar a tecnologia.

Fontes: www.mram-info.com/tags/mram-applications

Desafios e Outras Aplicações do Magnetismo

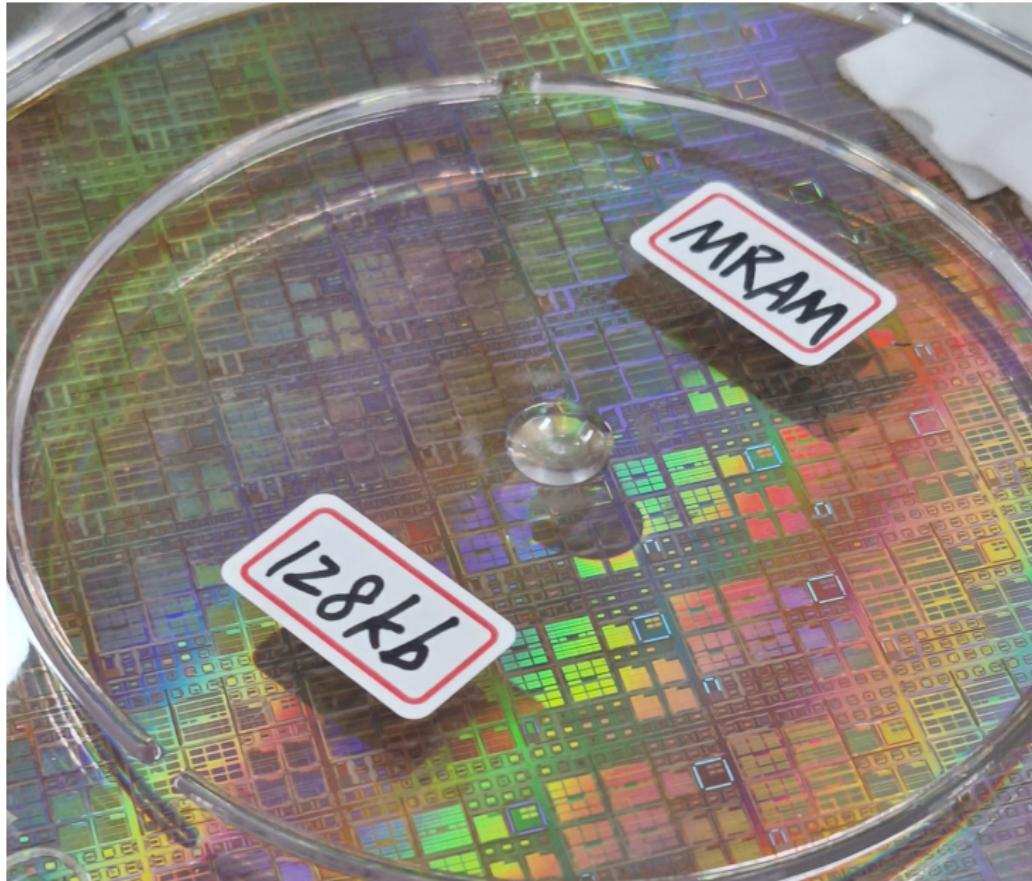
Desafios em MRAM (STT/SOT)

- Reduzir a **corrente de comutação** e o **consumo de energia**.
- Garantir **estabilidade térmica** e longa vida útil.
- Melhorar **densidade** e integração em nós CMOS avançados ($\approx 5\text{ nm}$).
- Viabilizar **comutação sem campo** externo em SOT-MRAM.
- Reduzir custos de fabricação em larga escala.

Outras aplicações do magnetismo

- **Armazenamento:** discos rígidos, fitas magnéticas.
- **Sensores:** bússolas de smartphone, sensores automotivos.
- **Saúde:** ressonância magnética (MRI), partículas magnéticas para fármacos.
- **Energia:** geradores e motores elétricos.

MRAM



Conteúdo

1 Introdução

2 Motivação

3 Teoria: DFT e Modelo de Heisenberg

4 Aplicações

5 Agradecimentos

Do problema de muitos corpos ao DFT

- Mesmo após a aproximação de Born–Oppenheimer, ainda precisamos resolver o problema eletrônico de N elétrons interagindo:

$$\hat{H}_{ele}\Psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = E\Psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N),$$

onde o termo de interação elétron–elétron torna a solução exata inviável para sólidos reais.

- **Teoria do Funcional da Densidade (DFT)** fornece uma forma prática de tratar sistemas com muitos elétrons:
 - Proposta por Hohenberg e Kohn (1964): a densidade eletrônica $n(\vec{r})$ contém **toda a informação** sobre o estado fundamental.
 - Em vez de buscar a função de onda de $3N$ dimensões, trabalha-se com a densidade $n(\vec{r})$ em 3 dimensões.
- Teorema de Hohenberg–Kohn:
 - Existe um funcional de energia $E[n]$ cujo mínimo fornece a densidade e energia do estado fundamental.

Equações de Kohn–Sham

- Kohn e Sham (1965) propuseram mapear o sistema real interagente para um **sistema fictício de elétrons não interagentes** que tem a **mesma densidade eletrônica**.
- Resolvem-se equações de partícula única:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{\text{eff}}[n](\vec{r}) \right] \phi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \phi_i(\vec{r}),$$

onde

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{ext}} + V_{\text{Hartree}}[n] + V_{\text{xc}}[n].$$

- A densidade é reconstruída a partir dos orbitais de Kohn–Sham:

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\phi_i(\vec{r})|^2.$$

- O termo V_{xc} contém efeitos de **troca e correlação**, e é onde entram as aproximações (LDA, GGA, híbridos, etc.).

Distribuição eletrônica (valência): Fe, Co, Ni, Cu



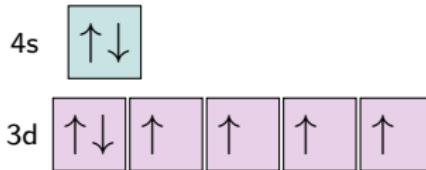
s-bloco



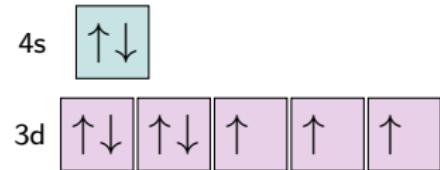
d-bloco

Regras de Hund: preenche \uparrow antes de parear \downarrow .

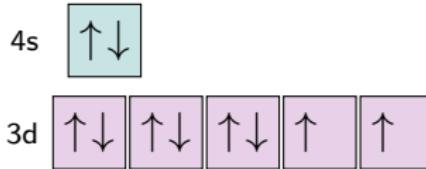
Fe: [Ar] 3d⁶ 4s²



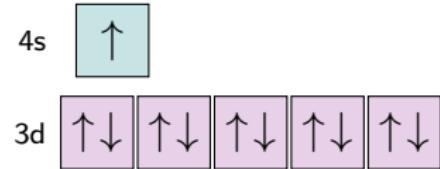
Co: [Ar] 3d⁷ 4s²



Ni: [Ar] 3d⁸ 4s²



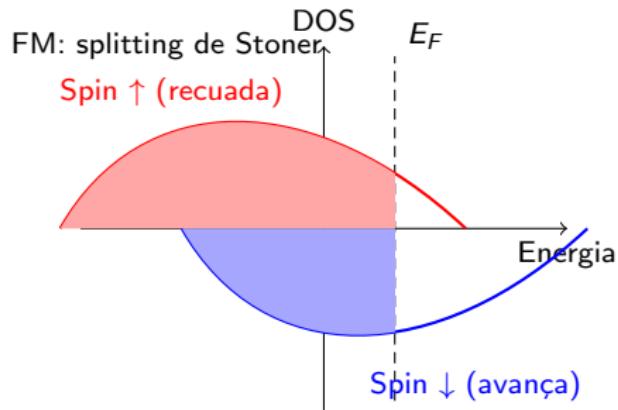
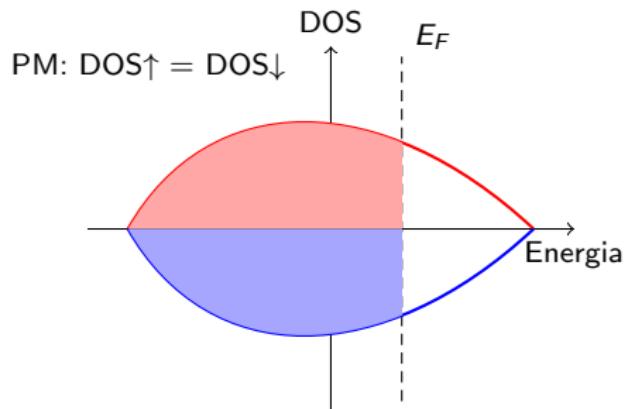
Cu: [Ar] 3d¹⁰ 4s¹



Modelo de Stoner via DOS (energia no eixo x)

Ideia-chave

- **PM:** $\text{DOS}^{\uparrow} = \text{DOS}^{\downarrow}$; ocupação igual até E_F .
- **FM:** splitting de Stoner
 - \uparrow (vermelha) *recuada*;
 - \downarrow (azul) *avança*.
- Ganho de **troca** vs **custo cinético**.
- Magnetiza se $I N(E_F) > 1$.



Magnetização e o modelo de Heisenberg

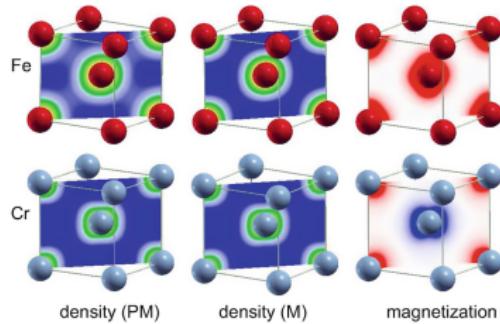


Figure: Densidade de carga e de magnetização do Fe e do Cr.

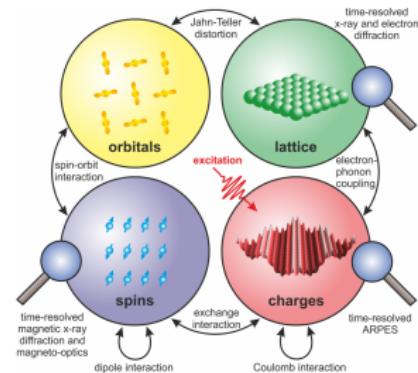
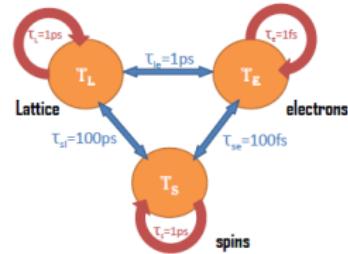
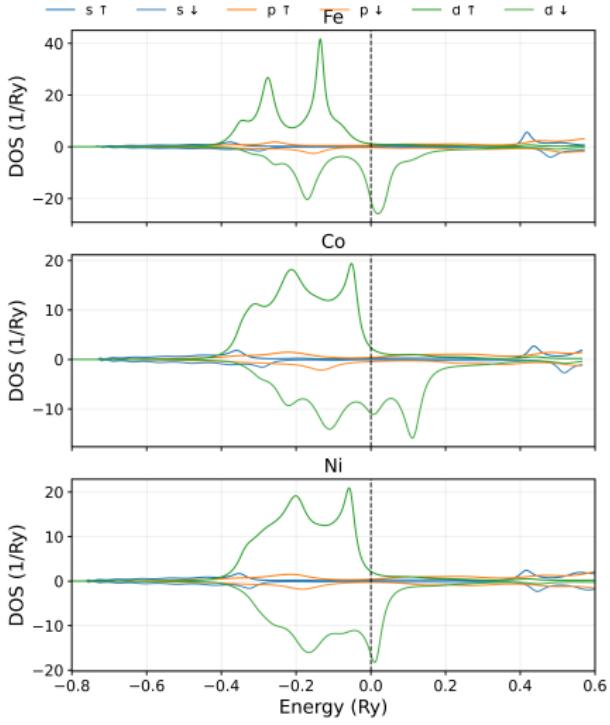
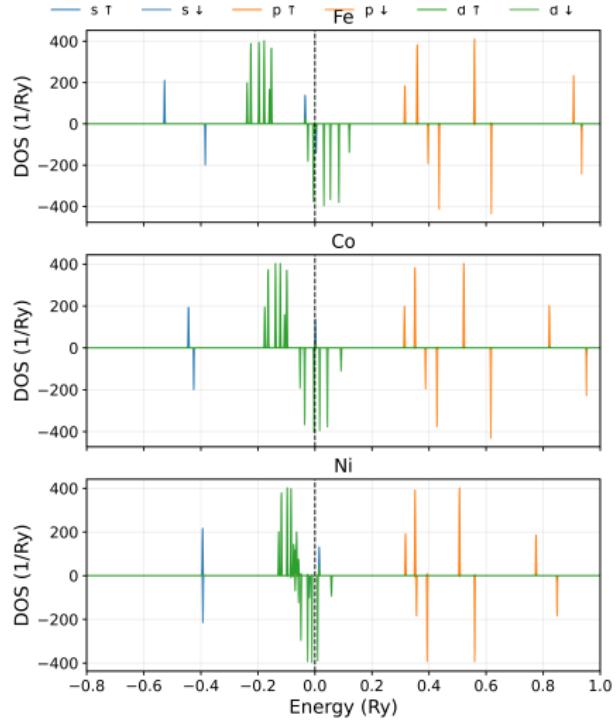


Figure: Diferente interações.



Dímeros e sólidos de Fe, Co e Ni



Dimer

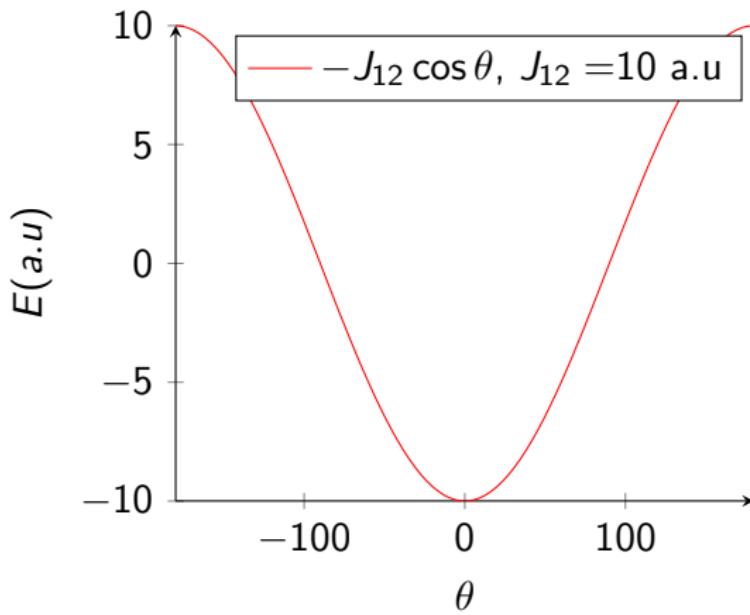
Partindo de uma Hamiltoniana de spin $H = -J_{12}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$, vamos considerar dois átomos descritos por

$$E = -J_{12} \cos \theta \quad (1)$$

Dimer

Partindo de uma Hamiltoniana de spin $H = -J_{12}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$, vamos considerar dois átomos descritos por

$$E = -J_{12} \cos \theta \quad (1)$$



Dimer

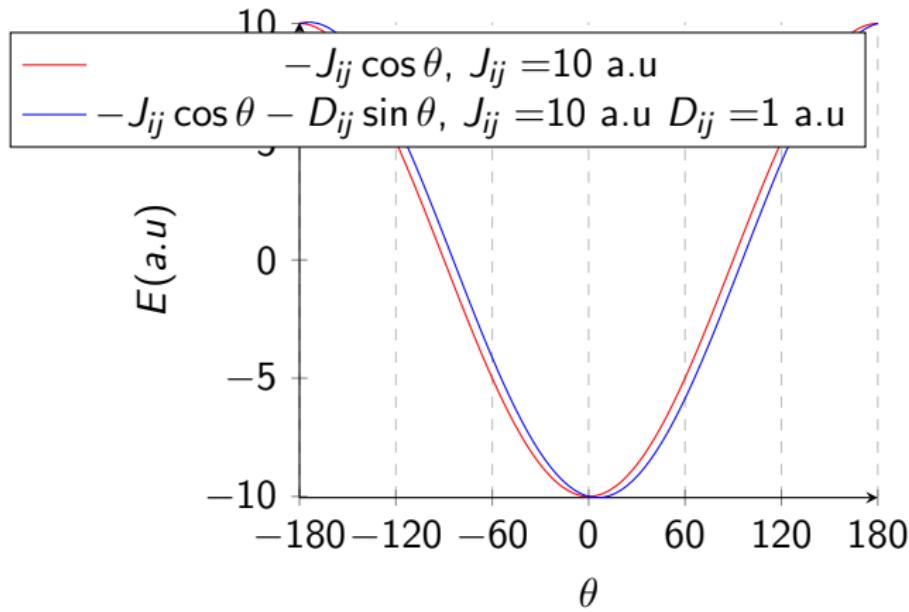
Agora com o termo DM $H = -J_{12}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - D_{12} \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)$ Vamos considerar dois átomos descritos por

$$E = -J_{12} \cos \theta - D_{12} \sin \theta \quad (2)$$

Dimer

Agora com o termo DM $H = -J_{12}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - \vec{D}_{12} \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)$ Vamos considerar dois átomos descritos por

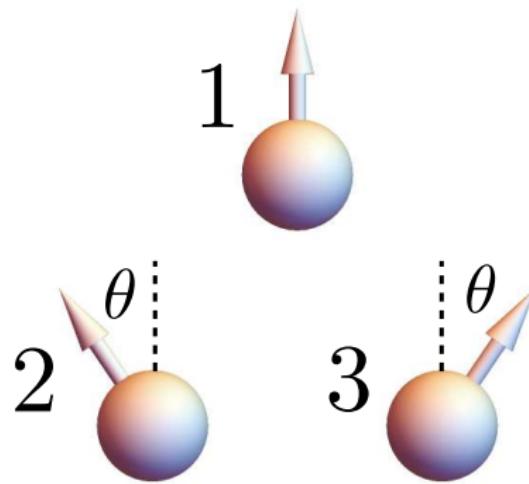
$$E = -J_{12} \cos \theta - D_{12} \sin \theta \quad (2)$$



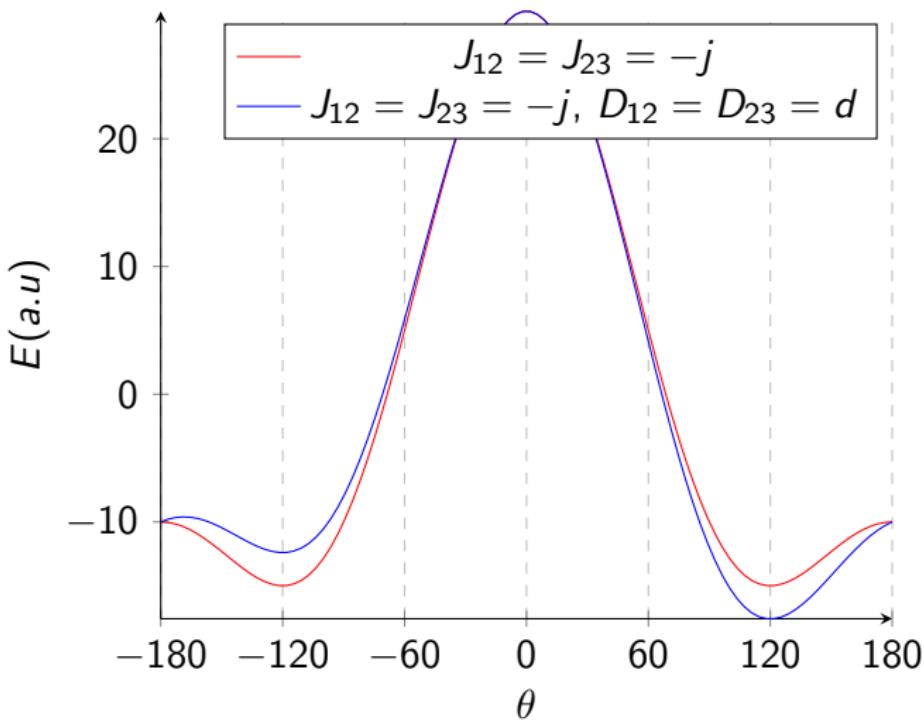
Trimer

Vamos considerar um trímero triangular descrito por

$$E = -(2J_{12} \cos \theta + J_{23} \cos 2\theta) - (2D_{12}^z \sin \theta - D_{23}^z \sin 2\theta) \quad (3)$$



Trimer



Por que o Ferro é Ferromagnético?

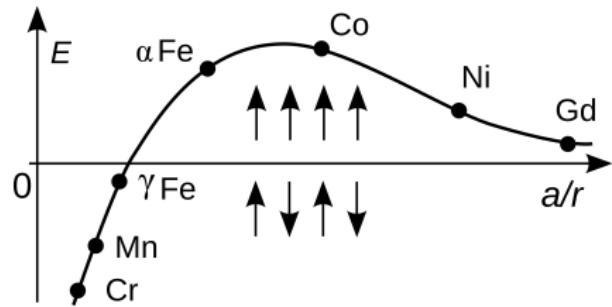


Figure: Proposta por John C. Slater em 1930 e graficamente representada por Bethe em 1933

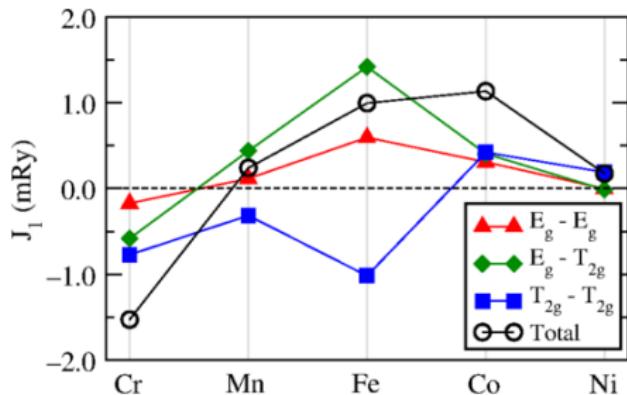


Figure: Figura do Phys. Rev. Lett. 116, 217202.

Por que o Ferro é Ferromagnético?

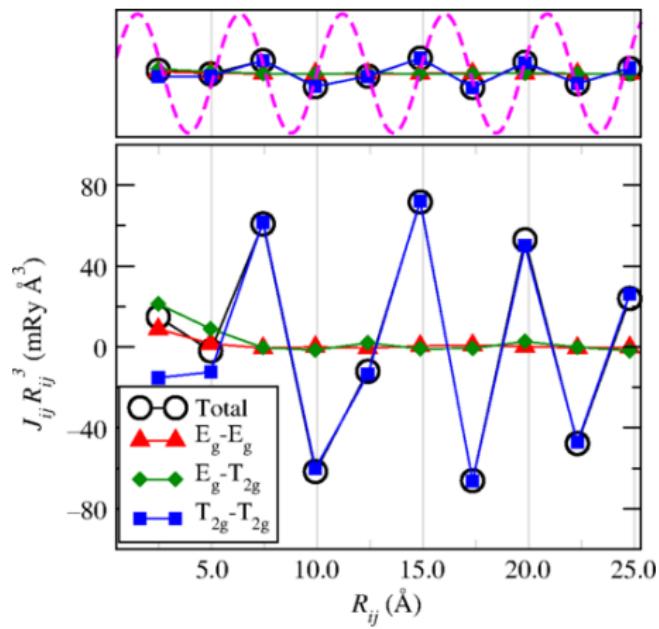


Figure: Interações entre orbitais Eg e Eg-T_{2g} são de curto alcance, enquanto que T_{2g}-T_{2g} são de longo alcance.

Methodology - how to? Exchange interactions

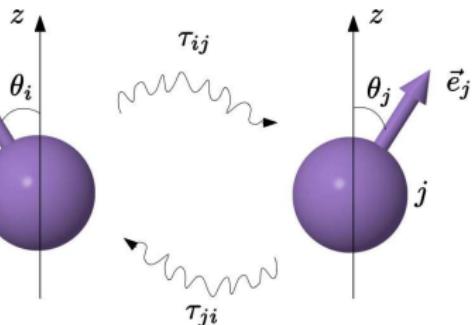
By means of Multiple Scattering Theory (MST), one can derive the two-site energy variation due to the Lloyd formula as follows

$$\delta E_{ij} = -\frac{1}{\pi} \Im \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \text{Tr}_{\sigma L} (\delta \mathbf{P}_i \tau_{ij} \delta \mathbf{P}_j \tau_{ji}) , \quad (4)$$

with

$$\delta \mathbf{P}_i = p_i \delta \vec{e}_i \vec{\sigma} \quad (5)$$

and



Two-site interaction

$$\tau_{ij} = T_{ij}^0 I_2 + \vec{T}_{ij} \cdot \vec{\sigma}. \quad (6)$$

Methodology - how to? Exchange interactions

Now, one can write

$$\begin{aligned} Tr_{\sigma L} (\delta P_i \tau_{ij} \delta P_j \tau_{ji}) &= 2 Tr_L \left(p_i T_{ij}^0 p_j T_{ji}^0 - p_i \vec{T}_{ij} p_j \vec{T}_{ji} \right) (\delta \vec{e}_i \delta \vec{e}_j) + \\ &\quad 2 Tr_L \left(p_i T_{ij}^\alpha p_j T_{ji}^\beta + p_j T_{ji}^\beta p_i T_{ij}^\alpha \right) \delta e_i^\alpha \delta e_j^\beta + \\ &\quad 2 Tr_L i \left(p_i T_{ij}^0 p_j \vec{T}_{ji} - p_j T_{ji}^0 p_i \vec{T}_{ij} \right) (\delta \vec{e}_i \times \delta \vec{e}_j), \end{aligned} \quad (7)$$

or

$$\delta E_{ij} = -2 \left(A_{ij}^{00} - \sum_{\mu=x,y,z} A_{ij}^{\mu\mu} \right) \delta \vec{e}_i \delta \vec{e}_j - 4 \sum_{\mu,\nu=x,y,z} \delta e_i^\mu A_{ij}^{\mu\nu} \delta e_j^\nu - 2 \vec{D}_{ij} (\delta \vec{e}_i \times \delta \vec{e}_j) \quad (8)$$

Introducing the matrices

$$A_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{\pi} \Im \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon Tr_L \left(p_i T_{ij}^\alpha p_j T_{ji}^\beta \right); \quad \hat{A}_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{\pi} \Re \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon Tr_L \left(p_i T_{ij}^\alpha p_j T_{ji}^\beta \right), \quad (9)$$

Methodology - how to? Exchange interactions

If mapped onto a Heisenberg Hamiltonian, one can identify

- Exchange coupling interaction J_{ij}

$$\delta E_{ij} = -2 \left(A_{ij}^{00} - \sum_{\mu=x,y,z} A_{ij}^{\mu\mu} \right) \delta \vec{e}_i \delta \vec{e}_j - 4 \sum_{\mu,\nu=x,y,z} \delta e_i^\mu A_{ij}^{\mu\nu} \delta e_j^\nu$$
$$- 2 \vec{D}_{ij} (\delta \vec{e}_i \times \delta \vec{e}_j)$$

Finally, one can write:

$$J_{ij} = A_{ij}^{00} - A_{ij}^{xx} - A_{ij}^{yy} - A_{ij}^{zz}, \quad \vec{D}_{ij} = \hat{A}_{ij}^{0\mu} - \hat{A}_{ij}^{\mu 0}. \quad (10)$$

Methodology - how to? Exchange interactions

If mapped onto a Heisenberg Hamiltonian, one can identify

- Exchange coupling interaction J_{ij}

$$\delta E_{ij} = -2 \left(A_{ij}^{00} - \sum_{\mu=x,y,z} A_{ij}^{\mu\mu} \right) \delta \vec{e}_i \delta \vec{e}_j - 4 \sum_{\mu,\nu=x,y,z} \delta e_i^\mu A_{ij}^{\mu\nu} \delta e_j^\nu$$
$$- 2 \vec{D}_{ij} (\delta \vec{e}_i \times \delta \vec{e}_j)$$

- Anisotropy term

Finally, one can write:

$$J_{ij} = A_{ij}^{00} - A_{ij}^{xx} - A_{ij}^{yy} - A_{ij}^{zz}, \quad \vec{D}_{ij} = \hat{A}_{ij}^{0\mu} - \hat{A}_{ij}^{\mu 0}. \quad (10)$$

Methodology - how to? Exchange interactions

If mapped onto a Heisenberg Hamiltonian, one can identify

- Exchange coupling interaction J_{ij}

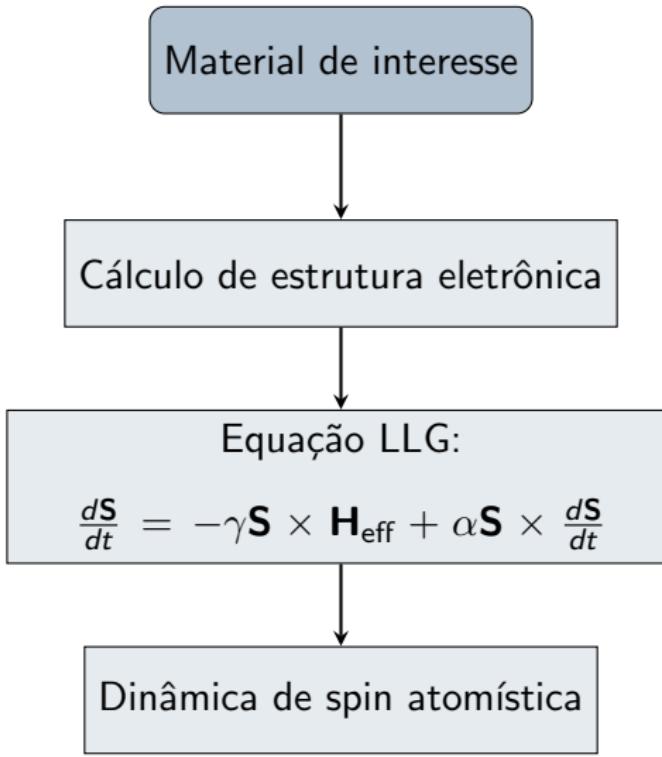
$$\delta E_{ij} = -2 \left(A_{ij}^{00} - \sum_{\mu=x,y,z} A_{ij}^{\mu\mu} \right) \delta \vec{e}_i \delta \vec{e}_j - 4 \sum_{\mu,\nu=x,y,z} \delta e_i^\mu A_{ij}^{\mu\nu} \delta e_j^\nu$$
$$- 2 \vec{D}_{ij} (\delta \vec{e}_i \times \delta \vec{e}_j)$$

- Anisotropy term
- Dzyaloshinskii-Moriya vector \vec{D}_{ij}

Finally, one can write:

$$J_{ij} = A_{ij}^{00} - A_{ij}^{xx} - A_{ij}^{yy} - A_{ij}^{zz}, \quad \vec{D}_{ij} = \hat{A}_{ij}^{0\mu} - \hat{A}_{ij}^{\mu 0}. \quad (10)$$

Contexto científico



Modelo de spin:

- Interação de troca:
$$\mathcal{H}_{\text{ex}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$
- Interação Dzyaloshinskii-Moriya:
$$\mathcal{H}_{\text{DMI}} = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)$$
- Anisotropia:
$$\mathcal{H}_{\text{ani}} = - \sum_i K_i (\mathbf{S}_i \cdot \hat{n})^2$$

Campo magnético efetivo:

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{\mu_s} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i}$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{ex}} + \mathcal{H}_{\text{DMI}} + \mathcal{H}_{\text{ani}}$$

Demo

Pâmela Carvalho (USP/IBM) e colaboradores.

Amorphous systems 100 atoms per unit cell

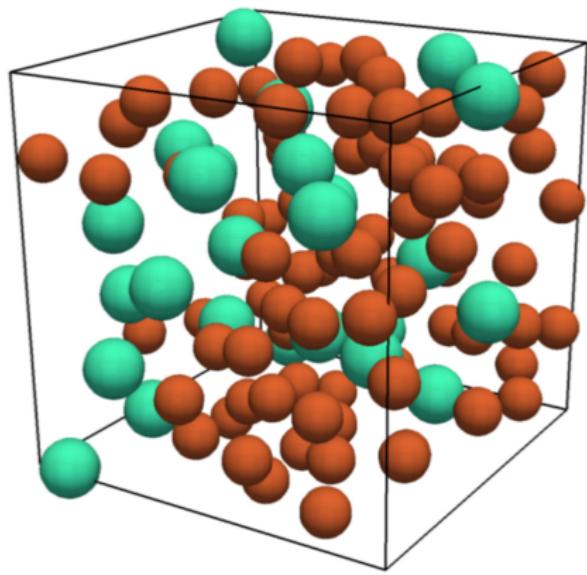


Figure: $\text{Fe}_{76}\text{Gd}_{24}$ amorphous unit cell

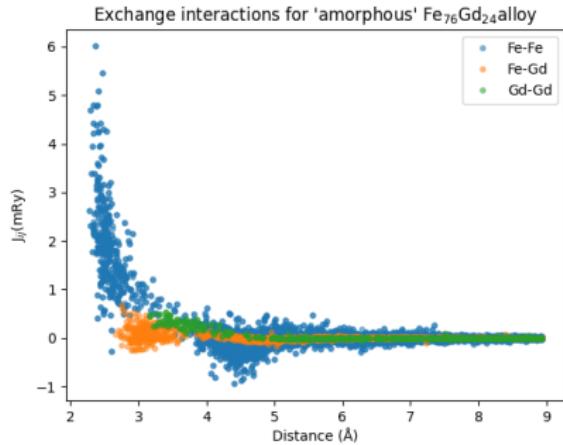


Figure: 17000 pair interactions. Each atom in the unit cell has 170 neighbors. 100 jobs submitted with 15 min per job necessary (170 pair interactions calculated in 15 minutes).

bcc Fe distorted

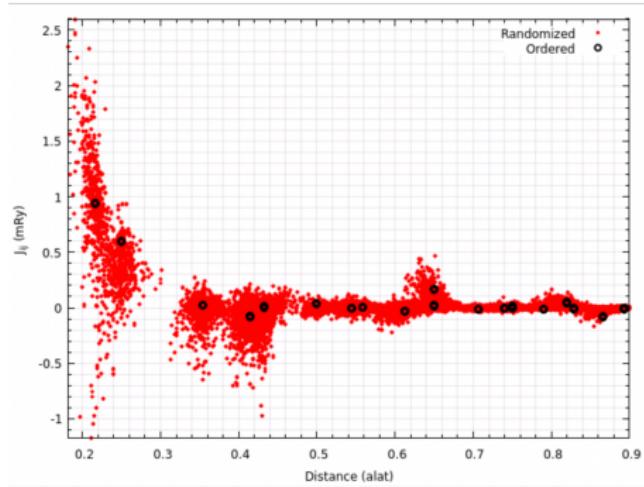


Figure: 49k exchange parameters J_{ij} for bcc Fe using a supercell with 128 atoms

Conteúdo

1 Introdução

2 Motivação

3 Teoria: DFT e Modelo de Heisenberg

4 Aplicações

5 Agradecimentos

O que podemos calcular que pode ser medido?

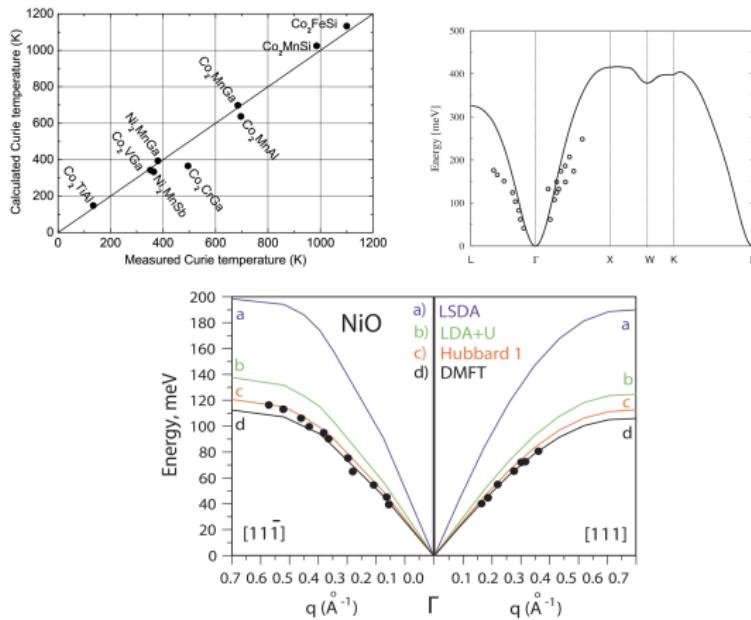


Figure: Figuras adaptadas do Rev. Mod. Phys.

95, 035004

Toy models

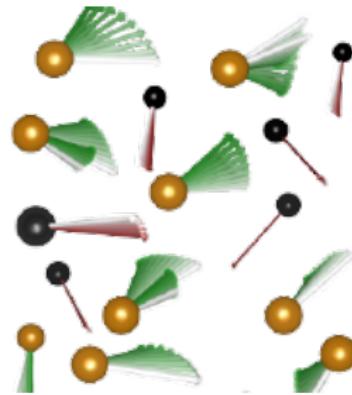


Figure: Códigos de dinâmica de spin. Cahmd à esquerda e UppASD a direita

Códigos que auxiliam no cálculo de parâmetros magnéticos 'da casa':
RS-LMTO-ASA e PAOFLOW.

Material magnético bi-dimensional Fe_3GeTe_2 : Processo de sintetização

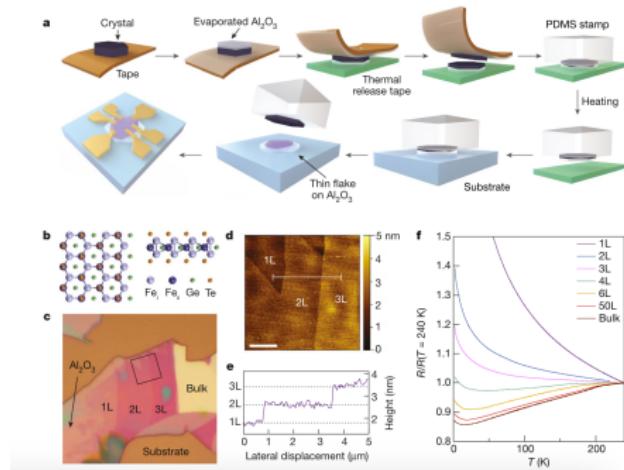


Figure: Fabricação do Fe_3GeTe_2 bi-dimensional. Nature 563, 94–99 (2018)

Fe_3GeTe_2 - Nanoflakes

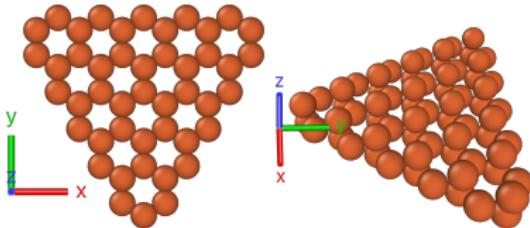
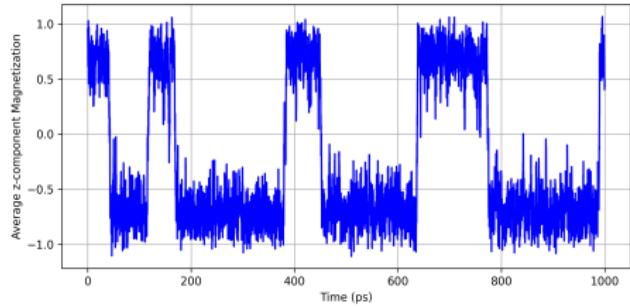
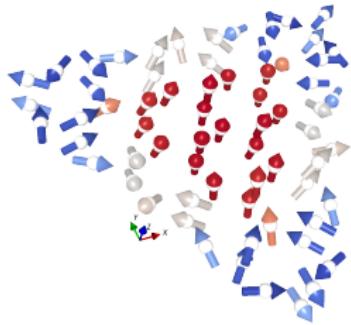
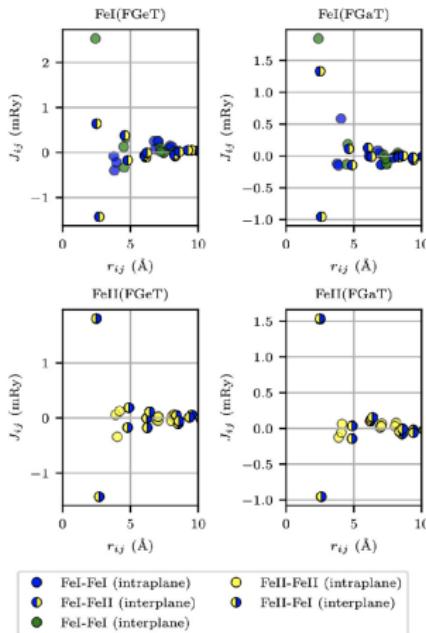
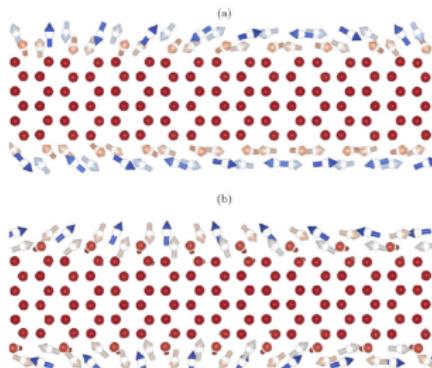


Figure: Visão superior e lateral do nanoflake do Fe_3GeTe_2 .





Both systems have non-collinear ordering at armchair edges



Effect on switching dynamics?

Figure: Parâmetros magnéticos da nanofita

Magnetismo não-colinear na borda

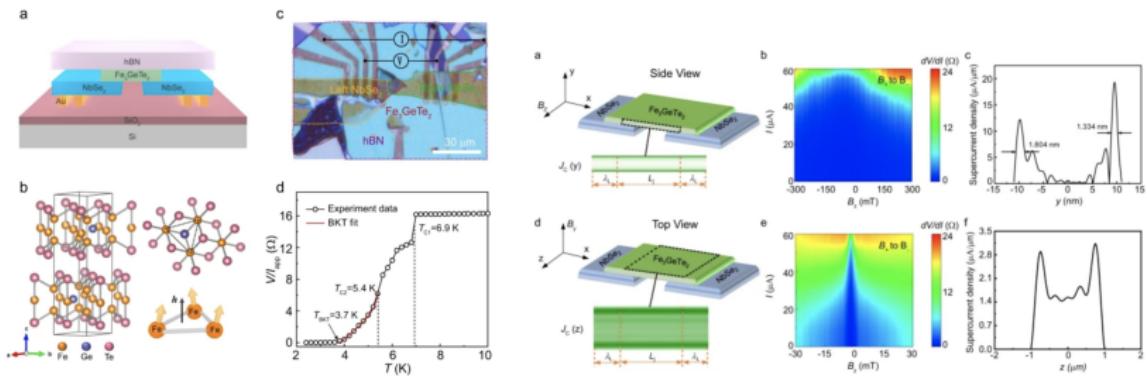
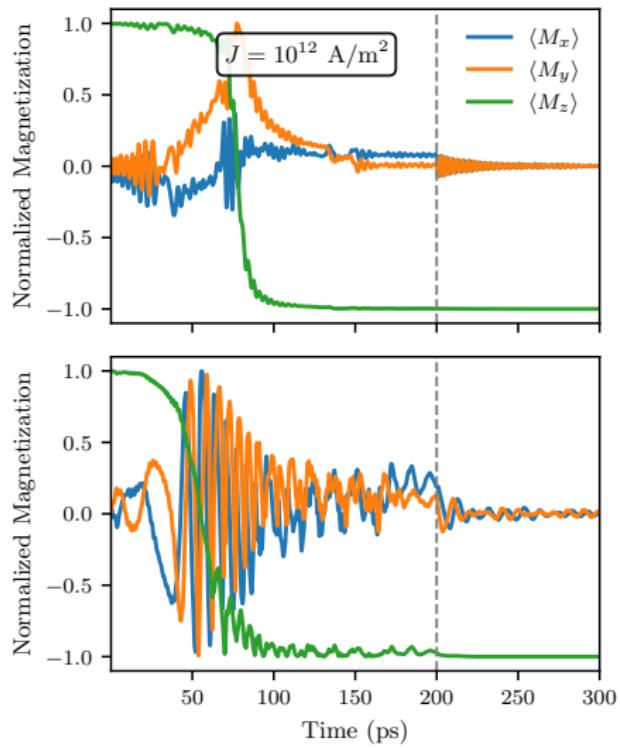


Figure: Supercorrente em uma junção Josephson lateral

Simulação dinâmica de spin clássica



Conteúdo

1 Introdução

2 Motivação

3 Teoria: DFT e Modelo de Heisenberg

4 Aplicações

5 Agradecimentos

Agradecimentos

UNIPÓSARIO 2026: Inscrições abrirão em breve

Publicado em 15/10/2025 08h28

Compartilhe: [f](#) [X](#) [in](#) [e](#) [p](#)

O Exame Unificado de Pós-Graduações em Física do Rio de Janeiro (UNIPÓSARIO) lança calendário para ingresso em 2026.1 nos programas de pós-graduação em física no Rio de Janeiro. As inscrições para o exame ficarão abertas de 29/10 a 17/11. Além disso, a nota de corte será divulgada a partir do dia 19/11.



Agradecimentos



DE 26 DE JANEIRO A

06 DE FEVEREIRO | 2026

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS | CBPF
RIO DE JANEIRO | BRASIL

Inscrições: 06/10 a 26/10 de 2025

Valor da inscrição: R\$ 200