

179

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E CRISTALINAS DE MULTICAMADAS Fe/Ag. *Ismael Stein Kuhn, Antonio Vanderlei dos Santos.* (Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões URI, Campus de Santo Ângelo).

A recente evolução da ciência dos materiais fez surgir novos sistemas que apresentam grande potencialidade de aplicações tecnológicas, além de apresentarem um problema científico bastante atual. Entre esses novos sistemas podemos destacar os sistemas como multicamadas e filmes finos magnéticos. Nestes materiais o cálculo da estrutura eletrônica é uma importante ferramenta para o estudo das propriedades magnéticas e estruturais. Uma vez que o desenvolvimento tecnológico dos últimos anos permitiu o aprimoramento dos computadores, os métodos computacionais de cálculo numérico receberam um grande impulso. Sendo assim o objetivo deste projeto consiste no estudo teórico e experimental das regiões de interface de sistemas metal/metal(Fe/Ag), além do aprimoramento dos métodos de cálculo de estruturas de bandas. Tal estudo torna-se importante, pois nestas regiões de interface surgem importantes e pitorescas propriedades, que alteram e governam o comportamento destes sistemas. Propriedades estas, ainda pouco conhecidas e estudadas. A resolução do problema da estrutura de bandas em multicamadas é equivalente a calcularmos os auto estados para um número infinito de férmions interagentes. Esta dificuldade é contornada transformando este problema para o problema de um elétron sujeito a um potencial efetivo, que consiste na soma do potencial eletrostático gerado pelos núcleos da rede cristalina, e o potencial gerado pelas cargas de todos os outros elétrons, mais a correção de correlação e troca. Os trabalhos tem a colaboração do Instituto de Física da UFRGS, Laboratório de Filmes finos. (FAPERGS)