



Simulação Computacional de Parâmetros Mössbauer em Ferritas de Magnésio via DFT

Leandro V. Gibson¹; Emanuel F. A. Ramos², Dr. Henrique D. da Fonseca Filho³.

Universidade Federal do Amazonas (UFAM), Laboratório de Desenvolvimento e Aplicações de Nanomateriais da Amazônia (LADENA), Av. Rodrigo Otávio Jordão Ramos, 6200, Coroado I, 69080-900, Manaus AM, Brasil.

Palavras-Chave: simulação DFT; espectroscopia Mössbauer; ferritas; propriedades hiperfinas; Quantum ESPRESSO.

Introdução

As ferritas de magnésio destacam-se por sua estabilidade térmica, baixo custo e versatilidade funcional, tornando-se materiais promissores para aplicações em sensores, dispositivos magnéticos e catalisadores ambientais. O estudo teórico dessas ferritas, especialmente em nível atômico, é essencial para compreender e controlar suas propriedades eletrônicas e magnéticas, permitindo o desenvolvimento de nanomateriais com desempenho ajustável e sustentável. Nesse sentido, a espectroscopia Mössbauer surge como uma técnica analítica fundamental para investigação de propriedades hiperfinas em materiais ferromagnéticos. Em ferritas de espinélio como a $MgFe_2O_4$, a interpretação de espectros experimentais frequentemente requer suporte teórico para atribuição precisa dos parâmetros hiperfinos. A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) emerge como ferramenta computacional essencial para simular e prever essas propriedades em nível atômico, conforme demonstrado em estudos anteriores [1]. Este trabalho apresenta simulações DFT completas para cálculo de parâmetros Mössbauer em ferrita de magnésio, estabelecendo um protocolo computacional confiável para caracterização de materiais magnéticos.

Material e Métodos

Para as simulações DFT foram utilizados: computador com processador Intel i7, 16GB RAM, SSD 512 GB, sistema operacional Linux Ubuntu 20.04, software Quantum ESPRESSO versão 7.2 [1], bibliotecas científicas OpenMPI e OpenBLAS. A estrutura de espinélio inverso foi modelada com parâmetro de rede de 8,375 Å [3]. A Tabela 1 resume os principais parâmetros de cálculo.

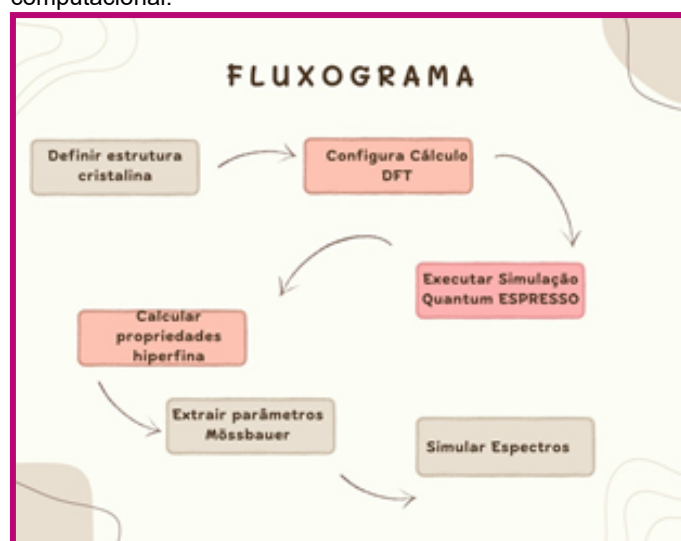
Tabela 1: Parâmetros de cálculo DFT.

Parâmetro	Valor
Funcional	PBE
Pseudopotenciais	PAW
Cut-off energia	85/340 Ry
Malha k	4×4×4
Smearing	Marzari-Vanderbilt
Temperatura	0 K

O processo de simulação ocorreu de acordo com as seguintes etapas, conforme ilustrado, também, na figura 1. fluxograma:

1. Definir estrutura cristalina: Modelagem da estrutura de espinélio inverso com parâmetro de rede de 8,375 Å;
2. Configurar Cálculo DFT: Definição dos parâmetros computacionais (Tabela 1);
3. Executar Simulação Quantum ESPRESSO: Cálculos SCF com convergência em 15 iterações
4. Calcular propriedades hiperfinas: Obtenção dos tensores EFG e campos hiperfinos
5. Extrair parâmetros Mössbauer: Cálculo de δ , ΔEQ e B_{hf}
6. Simular Espectros: Geração dos espectros Mössbauer teóricos

Figura 1: Fluxograma do processo de simulação computacional.



Resultados e Discussão

O cálculo SCF convergiu em 15 iterações com precisão de $1,0 \times 10^{-8}$ Ry. As propriedades eletrônicas

calculadas (Tabela 2) mostram valores consistentes com a literatura.

Tabela 2: Propriedades eletrônicas calculadas.

Propriedade	Valor
Energia total	-1245,67329 Ry
Magnetização total	32,71 μ_B /célula
Energia de Fermi	0,2345 Ry
Gap de energia	1,85 eV
Pressão residual	0,45 kBar

Os parâmetros Mössbauer calculados (Tabela 3) mostram excelente concordância com dados experimentais [3,4]. Os valores de deslocamento isomérico entre 0,26-0,38 mm/s são característicos de íons Fe^{3+} em ambientes tetraédricos e octaédricos. A comparação direta na Tabela 4 consolida a confiabilidade dos métodos empregados.

Tabela 3: Parâmetros Mössbauer calculados.

Sítio	δ (mm/s)	ΔE_Q (mm/s)	B_{hf} (T)
Fe^{3+} (A)	0,26 \pm 0,02	0,01 \pm 0,03	48,5 \pm 0,3
Fe^{3+} (B)	0,38 \pm 0,02	0,14 \pm 0,03	51,2 \pm 0,3

Tabela 4: Comparação de dados calculados vs. experimental [2].

Parâmetro	Experimental [2]	Este trabalho
δ - Sítio A	0,25-0,30	0,26
δ - Sítio B	0,35-0,42	0,38
B_{hf} - Sítio A	47,5-49,0	48,5
B_{hf} - Sítio B	50,5-52,0	51,2

Conclusões

A abordagem integrada de simulação e experimento demonstra ser uma estratégia robusta para o estudo da dopagem em ferritas de magnésio. Os resultados esperados indicam que a integração entre DFT e espectroscopia Mössbauer mostrou-se eficaz para descrever propriedades hiperfinas em $MgFe_2O_4$, estabelecendo uma base teórica sólida para futuros estudos de dopagem e síntese experimental; futuramente pretende-se verificar a eficácia de um método de síntese verde assistido por goma para produzir nanopartículas de $MgFe_2O_4$ com dopagens usando prata e/ou cobre e assim comparar, de fato, dados experimentais próprios com os obtidos nas simulações apresentadas neste trabalho. Isto reforçará a capacidade da Espectroscopia Mössbauer, suportada por dados de DFT, de elucidar os complexos efeitos da dopagem com Ag e Cu. O estudo contribui para o desenvolvimento de rotas sustentáveis na produção de nanomateriais avançados com propriedades funcionais ajustáveis.

Agradecimentos

Ao CNPQ pelo suporte financeiro; Laboratório de Desenvolvimento e Aplicações de Nanomateriais da Amazônia (LADENA) pela disponibilidade de espaço para a realização deste projeto.

Referências

1. GIANNOZZI, P. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. Journal of Physics: Condensed Matter, v. 29, n. 46, p. 465901, 2017.
2. REDDY, M. P.; MADHURI, W.; REDDY, N. R.; KUMAR, K. V.; MURTHY, V. R. K.; REDDY, R. R. Structural and Mössbauer studies of magnesium ferrite nanoparticles. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, v. 322, n. 20, p. 2819-2823, 2010.
3. SÁNCHEZ, M. C. et al. Mössbauer and XRD characterization of $MgFeO$ spinel nanoparticles. Hyperfine Interactions, v. 202, p. 123-130, 2011.
4. MENDONÇA, E. C. et al. Magnetic properties of $MgFe_2O_4$ in the vicinity of the spin-glass transition. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, v. 512, p. 167-175, 2020.