
PROJETO DE PESQUISA

Programa de Iniciação Científica e Tecnológica – CBPF

Nome do Orientador e Coordenação (Pesquisador):

Dr. Flaviano José Marchiori dos Santos - COTEO

Título do Projeto:

Navegando pelo mundo quântico dos magnons topológicos e das estruturas de spin quirais

Palavras-chave: **Magnetismo não colinear; estados topológicos; ondas de spin; dinâmica de spins.**

Área de conhecimento: **Física da matéria condensada; magnetismo; spintrônica.**

Pré-requisitos desejáveis (se houver): **Interesse em métodos computacionais e/ou analíticos.**

Pré-requisitos obrigatórios (se houver): **Entusiasmo e curiosidade científica.**

Possibilidade de orientação remota:

(**X**) Sim

() Não

Rio de Janeiro, 21 de fevereiro de 2026

PROJETO:

Introdução

Materiais magnéticos podem hospedar estados exóticos como skyrmions e ondas de spin topológicas, cuja estabilidade e dinâmica são promissoras para, entre outros, a spintrônica e computação neuromórfica [1,2]. Apesar do avanço na descoberta de novos materiais, como os altermagnetos e os materiais com texturas não colineares, desafios persistem na compreensão sistemática da formação e da manipulação desses estados, cruciais para aplicações tecnológicas. A interação de Dzyaloshinskii-Moriya (DMI), originada do acoplamento spin-órbita, é chave para gerar texturas de spin chirais, podendo até mesmo induzir gaps topológicos no espectro de magnons em materiais centrosimétricos, como recentemente demonstrado para o Mn_5Ge_3 [3].

Simulações de primeiros princípios, baseadas na teoria do funcional da densidade (DFT), são ferramentas indispensáveis para identificar e testar materiais promissores e fornecer *insights* microscópicos. No entanto, para acessar escalas de tempo e comprimento relevantes para a dinâmica de spins, é necessário mapear os resultados dos cálculos de DFT em modelos efetivos de spin (Hamiltoniano de Heisenberg). Este projeto visa explorar essa abordagem multiescala para investigar as propriedades topológicas de materiais magnéticos, focando também em filmes finos de Mn_5Ge_3 e Mn_5Si_3 , combinando a precisão da DFT com a eficiência de simulações atomísticas de spin.

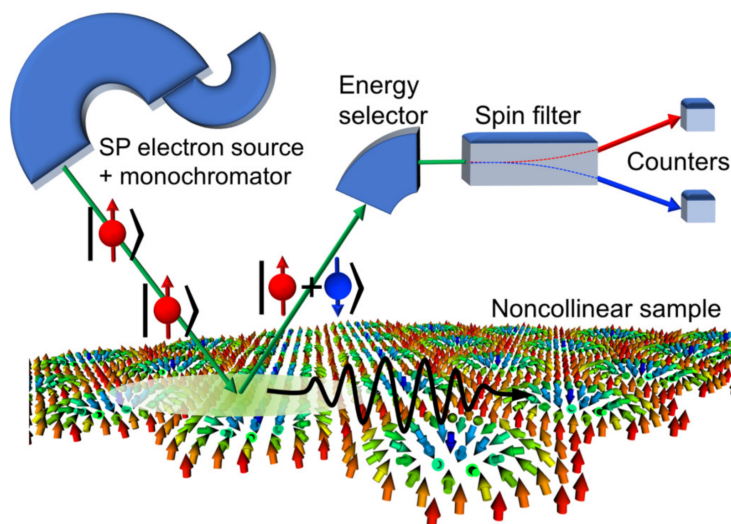


Figura 1. Um feixe de elétrons polarizados atinge a superfície de um material magnético não colinear e excita ondas de spin. Os elétrons refletidos são coletados e analisados quanto à sua energia e orientação de spin. Adaptado da Ref. [4].

Objetivos

O objetivo principal é investigar as propriedades estáticas e dinâmicas de materiais magnéticos com texturas não colineares, com ênfase em suas características topológicas. Especificamente, busca-se:

1. Utilizar a DFT para calcular as propriedades eletrônicas e magnéticas fundamentais de materiais-alvo (Mn_5Ge_3 , Mn_5Si_3 , entre outros).
2. Parametrizar Hamiltonianos de Heisenberg generalizados (com interação de troca, DMI, anisotropia) através do método de rotações infinitesimais.
3. Simular a dinâmica de spins para determinar a estabilidade de fases magnéticas (incluindo skyrmions) e os mecanismos de relaxação.
4. Calcular o espectro de ondas de spin (magnons) utilizando a teoria linear, permitindo a comparação direta com experimentos de espalhamento inelástico de nêutrons, ver Fig. 1.

O projeto também visa introduzir o bolsista aos conceitos de magnetismo, DFT, topologia e simulação computacional, capacitando-o na preparação de relatórios e manuscritos científicos. O bolsista receberá treinamento em Linux, Python e LaTeX para executar as simulações e analisar os dados.

Métodos

A metodologia será multiescala:

1. Primeiros Princípios (DFT): Cálculos de estrutura eletrônica serão realizados com os códigos *open-source* Quantum ESPRESSO [5] e JuKKR. Serão obtidas a densidade de estados, momentos magnéticos e a estrutura de bandas.
2. Modelagem Hamiltoniana: As interações magnéticas (de troca, DMI, anisotropia) serão extraídas dos cálculos DFT utilizando o método das rotações infinitesimais [6], implementado em pacotes como o TB2J. Isso resultará em um Hamiltoniano de spin clássico específico para cada material.
3. Simulações de Spin: A dinâmica dos spins será simulada resolvendo a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (códigos Vampire/Spirit) para estudar a estabilidade de texturas. Simulações de Monte Carlo serão usadas para investigar propriedades termodinâmicas e diagramas de fase.
4. Análise de Excitações: O espectro de ondas de spin será calculado utilizando a teoria linear e o pacote SWIS (desenvolvido pelo orientador) [6], permitindo simular o espectro de espalhamento inelástico de nêutrons para comparação experimental, ver exemplo na Fig. 2.

Forma de Análise dos Resultados

A análise será iterativa e comparativa. Primeiro, os resultados da DFT (band gaps, momentos magnéticos) serão validados contra a literatura e dados experimentais existentes. As interações de troca e DMI serão então analisadas quanto à sua magnitude e ao seu alcance. A configuração de spin do estado fundamental, obtida nas simulações de dinâmica, será comparada com dados de difração de nêutrons. A etapa crucial será a análise das curvas de dispersão de magnons: a presença de gaps topológicos, a

quiralidade dos modos e a existência de estados de superfície serão investigados e comparados com as previsões teóricas e, futuramente, com experimentos de espalhamento de nêutrons em colaboração com o Dr. N. Biniskos (ILL, França).

Veículos de Divulgação

Os resultados serão divulgados pelo bolsista em seminários internos no CBPF e na sua instituição de origem, assim como na Semana da Iniciação Científica do CBPF e em conferências nacionais como o Encontro de Outono da SBF. O orientador apresentará os resultados em congressos internacionais. Dependendo da relevância, os resultados poderão ser submetidos para publicação em revistas internacionais revisadas por pares e divulgados em plataformas como ResearchGate e LinkedIn.

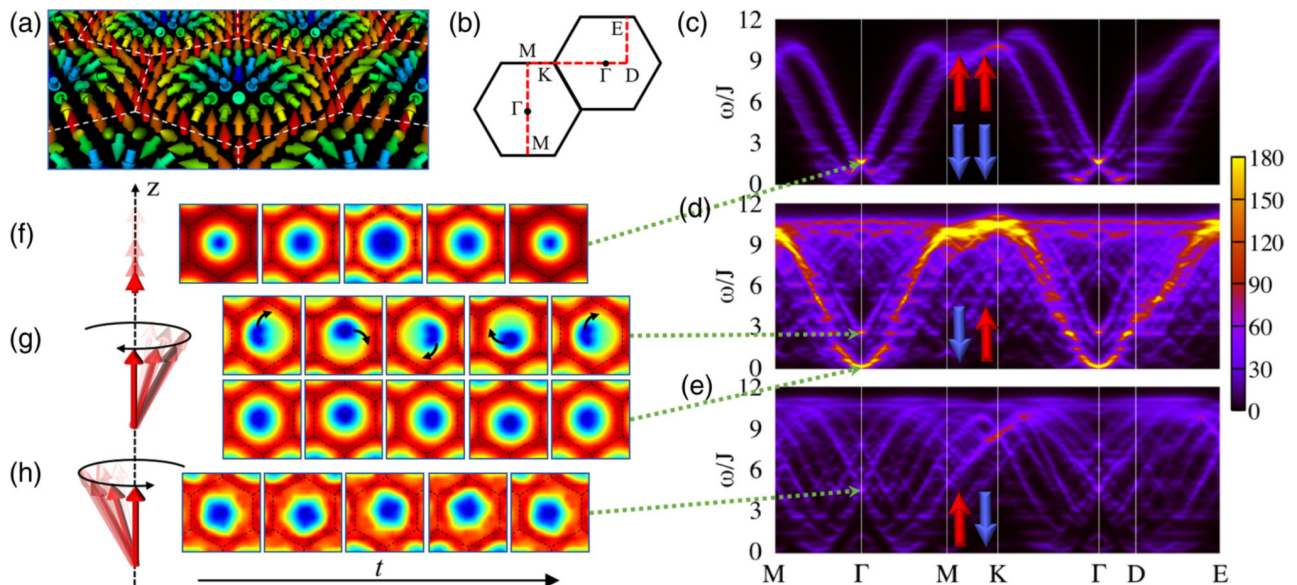


Figura 2. (a) Configuração de spin do estado fundamental formando uma rede de skyrmions. (b) Caminho no espaço recíproco. (c)-(e) Espectros do inespalhamento inelástico devido as ondas de spin. (f)-(h) *Snapshots* da dinâmica das ondas de spin nos picos espectrais: (f) modo de respiração (canal sem *flip*), (g) modo de rotação horária (canal *down-up*) e (h) anti-horária (canal *up-down*). Adaptado da Ref. [4].

Referências

- [1] N. Nagaosa and Y. Tokura, Nat. Nanotechnol. **8**, 899 (2013).
- [2] A. Fert, N. Reyren, and V. Cros, Nat. Rev. Mater. **2**, 17031 (2017).
- [3] M. dos Santos Dias, N. Biniskos, F. J. dos Santos, *et al.*, Nat. Commun. **14**, 1 (2023).
- [4] F.J. dos Santos, M. dos Santos Dias, *et al.*, Phys. Rev. B **97**, 024431 (2018).
- [5] P. Giannozzi, *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 465901 (2017).
- [6] A. I. Liechtenstein, *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **67**, 65 (1987).