

PROJETO – DE – PESQUISA

Programa de Iniciação científica e Tecnológica

CBPF

Nome do pesquisador ou tecnologista (orientador interno): João Paulo Sinnecker

Coordenação: COMAN

Nome do pesquisador ou tecnologista (coorientador/colaborador externo, se houver):
Luiz Augusto Souza de Oliveira

Instituição de Pesquisa Externa (se houver): UFRJ/Xerém

Título do projeto: **Investigação Experimental e Simulações Atomísticas das Propriedades Magnéticas em Ligas Metálicas e Nanopartículas: Estudo Integrado para Aplicações Avançadas.**

Palavras-chave: nanomagnetismo, nanopartículas, síntese de nanopartículas, simulação atomística, materiais magnéticos

Área de conhecimento: Magnetismo, Materiais Magnéticos

Pré-requisito desejado (se houver): _____

Possibilidade de orientação remota: Sim Não

Resultante principal do Projeto:

- Publicação (horizonte de 4 anos).
- Preparação do bolsista para área científica.
- Produto tecnológico.
- Produto educacional ou didático.

Rio de Janeiro, 6 de abril de 2023

Projeto

Investigação Experimental e Simulações Atomísticas das Propriedades Magnéticas em Ligas Metálicas e Nanopartículas: Estudo Integrado para Aplicações Avançadas.

Neste projeto, investigamos as propriedades magnéticas de ligas metálicas e nanopartículas através de síntese experimental, e também utilizando simulações atomísticas com o código de simulação magnética VAMPIRE [1], desenvolvido pela Universidade de York, Reino Unido, como ferramenta de apoio. O objetivo principal é compreender o comportamento magnético e as características das ligas metálicas e nanopartículas em diferentes condições, proporcionando informações valiosas para aplicações em diversos setores, como eletrônica, biomedicina e novos materiais [2].

Inicialmente, realizamos uma revisão abrangente da literatura para identificar as lacunas no conhecimento atual e estabelecer objetivos claros para nossa pesquisa. Em seguida, selecionamos os sistemas de ligas metálicas e nanopartículas de interesse com base em sua relevância para as aplicações e nos objetivos da pesquisa.

Sintetizamos experimentalmente as ligas metálicas e nanopartículas utilizando técnicas apropriadas, como co-precipitação, sol-gel e abordagens bottom-up [3-5]. Paralelamente, com o auxílio do software VAMPIRE, desenvolvemos modelos atomísticos das amostras estudadas, definindo a estrutura de rede, as interações de troca magnética e outros parâmetros relevantes. Realizamos uma série de simulações, variando parâmetros como temperatura, campo magnético externo e defeitos na rede, para estudar suas propriedades magnéticas e comportamento.

Analizamos os resultados experimentais e das simulações, comparando-os entre si e com previsões teóricas anteriores, bem como identificando tendências e anomalias. Com base nesta análise, propomos explicações para o comportamento magnético observado e sugerimos possíveis aplicações e melhorias no desempenho das ligas metálicas e nanopartículas.

A comparação dos resultados das simulações com os dados experimentais permitirá avaliar a precisão dos modelos e parâmetros utilizados, além de fornecer informações detalhadas sobre os mecanismos subjacentes ao comportamento magnético nas amostras estudadas. Através deste estudo integrado, buscamos otimizar o desempenho das ligas metálicas e nanopartículas magnéticas para diversas aplicações, como armazenamento de dados, catálise, biomedicina, sensores magnéticos e meio ambiente. A compreensão aprofundada das propriedades magnéticas em diferentes escalas também contribuirá para o desenvolvimento de novos materiais e dispositivos à base de ligas metálicas e nanopartículas.

Referências

- [1] Evans, R. F. L., Fan, W. J., Chureemart, P., Ostler, T. A., Ellis, M. O. A., & Chantrell, R. W. (2014). Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 26(10), 103202. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/10/103202>
- [2] Tran, H. V., Ngo, N. M., Medhi, R., Srinoi, P., Liu, T., Rittikulsittichai, S., & Lee, T. R. (2022). Multifunctional Iron Oxide Magnetic Nanoparticles for Biomedical Applications: A Review. *Materials* 2022, Vol. 15, Page 503, 15(2), 503. <https://doi.org/10.3390/MA15020503>.
- [3] Jalil, W. B. F., Pentón-Madrugal, A., Mello, A., Carneiro, F. A., Soares, R. M., Baptista, L. S., Sinnecker, J. P., & de Oliveira, L. A. S. (2017). Low toxicity superparamagnetic magnetite nanoparticles: One-pot facile green synthesis for biological applications. *Materials Science and Engineering C*, 78, 457–466. <https://doi.org/10.1016/j.msec.2017.04.066>.
- [4] Ansari, M. J., Kadhim, M. M., Hussein, B. A., Lafta, H. A., & Kianfar, E. (2022). Synthesis and Stability of Magnetic Nanoparticles. *BioNanoScience*, 12(2), 627–638. <https://doi.org/10.1007/S12668-022-00947-5/FIGURES/2>
- [5] Samuel, M. S., Ravikumar, M., John, A., Selvarajan, E., Patel, H., Chander, P. S., Soundarya, J., Vuppala, S., Balaji, R., & Chandrasekar, N. (2022). A Review on Green Synthesis of Nanoparticles and Their Diverse Biomedical and Environmental Applications. In *Catalysts* (Vol. 12, Issue 5). MDPI. <https://doi.org/10.3390/catal12050459>