

047

**CÁLCULO DAS PROPRIEDADES TERMICAS USANDO O MODELO DE DOIS NÍVEIS.***Edenilso Wohlenberg, João C. Krause, Antonio Vanderlei dos Santos (GIESS, Departamento. Ciências Exatas e da Terra, URI - Campus Santo Ângelo)*

Estudo teórico da estrutura de banda de sólidos, com a construção do modelo de dois níveis para o cálculo de propriedades térmicas utilizando primeiros princípios para diversos compostos. Para o cálculo da energia total da formação do sólido utilizamos o método Linear muffin-tin orbital (LMTO). Através dos polinômios encontrados relacionando espaçamento de rede com a energia total é encontrado o raio de Wigner - Seitz, o módulo de Bulk e o  $\Delta E$ . Após é calculado o teta de Debye, que é interpolado pela função de Debye para achar a energia livre para diferentes temperaturas. Em seguida é calculado os valores do raio de Wigner-Seitz para o mínimo da energia livre para cada temperatura. Com esses valores é calculado o coeficiente de expansão térmica e o módulo de Bulk variando com a temperatura. Os cálculos foram realizados utilizando-se programas desenvolvidos durante o projeto. Estes programas foram desenvolvidos utilizando-se da linguagem Fortran-90, pois a mesma é muito utilizada no meio científico e apresenta desempenho e precisão suficiente, o que se faz necessário para a correta obtenção dos resultados. Foram realizados cálculos utilizando o nitreto  $Fe_3Ni$  e apresenta-se os seguintes resultados para o módulo de Bulk paramagnético 3047.59162 Kbar e para o módulo de Bulk ferromagnético 1862.75391 Kbar e o  $\Delta E$  3.2717 mryd. (PIIC/URI)