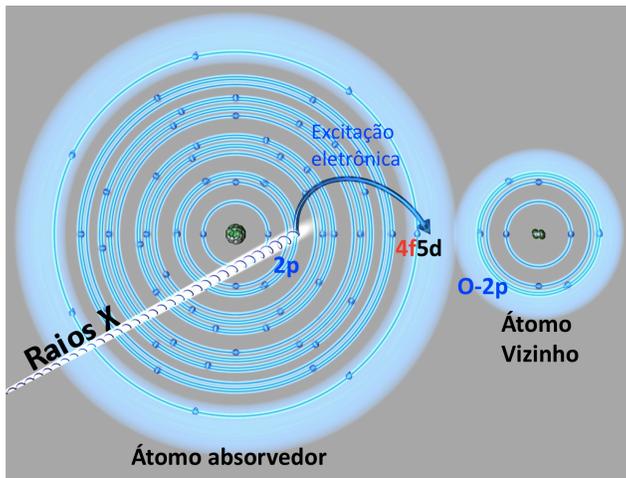


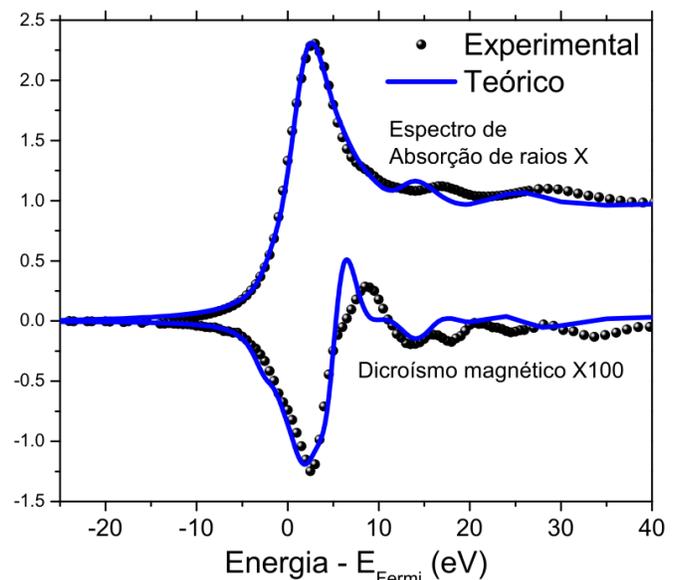
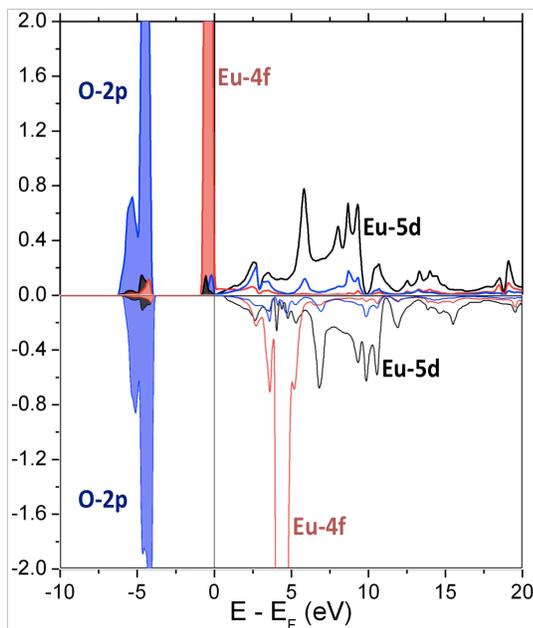
# Simulações e experimentos de espectroscopia de raios X em materiais magnéticos e supercondutores: interface entre física experimental e teórica.

Pesquisador responsável: Narcizo M. Souza Neto  
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

**Nesse projeto propomos realizar:** Simulações de espectros de absorção usando densidades eletrônicas de estados determinadas por métodos de primeiros princípios. Medidas experimentais de espectros de absorção e dicroísmo para materiais magnéticos e supercondutores clássicos. Simulações de espectros de absorção e dicroísmo magnético de forma consistente com os dados experimentais obtidos.

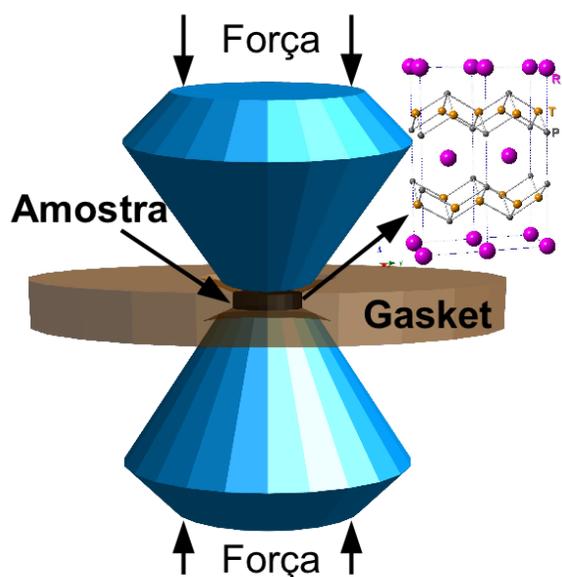


Espectroscopia de absorção de raios X (XAS: X-ray Absorption Spectroscopy) corresponde à medida da seção de choque para a absorção de fótons pelos elétrons de camadas internas. Quando um fóton de raios X possui energia suficiente para arrancar um elétron de níveis de caroço (figura ao lado) há o aparecimento de uma borda de absorção (figura abaixo). Devido à sua seletividade química e orbital, ela permite a investigação da ordem estrutural local em torno de um dado átomo em uma matriz complexa, a determinação da sua estrutura eletrônica e, devido à abertura proporcionada pelas propriedades de polarização bem definidas da luz síncrotron, o conhecimento da sua estrutura anisotrópica, tanto geométrica quanto magnética.



A esquerda estão simulações teóricas de densidades eletrônicas de estados desocupados como função da energia do elétron excitado por raios X. Essas densidades são usadas para calcular espectros de absorção e de dicroísmo magnético de raios X, que estão a direita comparados com dados experimentais.

Dicroísmo magnético circular de raios X (XMCD) existe devido a presença de acoplamento spin-órbita que faz com que o momento orbital dos fótons de raios X seja transferido para o spin do fotoelétron ejetado de níveis de caroço para a banda de valência. Fazendo a diferença de espectros de absorção medidos usando raios X circularmente polarizados com helicidades opostas iremos observar o sinal dicróico próximo ao nível de Fermi devido a diferença entre as densidades de estados desocupados permitidos para elétrons com spin para cima e para baixo (figura acima). Sinais de XMCD são comumente medidos para materiais ferromagnéticos, pois estes apresentam ordem magnética macroscópica. A seletividade ao elemento químico e ao orbital (4d, 5d, 4f, etc) e a possibilidade de sondar experimentalmente as estruturas eletrônicas dependentes de spin de um material tornam XMCD uma técnica essencial para o estudo das interações de troca que governam o magnetismo.



O estudo de propriedades da matéria sob condições de altas pressões tiveram início com os experimentos pioneiros em 1908 realizados por Percy Bridgman, os quais em conjunto com um vasto desenvolvimento de técnicas de altas pressões lhe valeram o prêmio Nobel de física em 1946. Desde a década de 1980 muitas das técnicas evoluíram dramaticamente e hoje é possível alcançar pressões tão altas quanto as condições no centro da terra (300 GPa e 3000°C) usando células de bigornas de diamante (figura ao lado). Experimentos de XAS/XMCD sob altas pressões poderão ser realizados, em conjunto com o desenvolvimento de projetos de alunos de doutorado do grupo, para determinar como a contração da rede atômica afeta as estruturas eletrônica e magnética em materiais. Nesse projeto de iniciação científica o/a estudante terá a oportunidade de realizar experimentos de XAS/XMCD em materiais magnéticos clássicos (como metais de terras raras puras) e supercondutores (como metais 5d).

Para uma formação completa de um físico é importante que ele tenha a oportunidade de interagir tanto com técnicas experimentais quanto com interpretações teóricas dos resultados. Propomos que nesse projeto sejam usados tanto métodos experimentais quanto teóricos para entender a competição entre o magnetismo e supercondutividade em materiais de interesse. Por exemplo, é imprescindível que cálculos da estrutura eletrônica que se propõem a explicar propriedades macroscópicas dos materiais tenham uma base e suporte em experimentos tais como XAS e XMCD que são sensíveis a efeitos eletrônicos. Serão realizados cálculos teóricos de espectros de absorção usando um formalismo de funções de Green para ajudar na interpretação dos resultados experimentais. Também serão realizados cálculos de estrutura eletrônica e magnética usando a teoria do funcional densidade (DFT) e formalismo de funções de Green para interpretar experimentos de XAS/XMCD em altas pressões. Espectros de XAS e de dicroísmo magnético de raios X podem ser calculados por métodos de primeiros princípios, usando as informações das densidades de estados eletrônicos dependentes de spin, os potenciais atômicos determinados e os elementos de matriz do Hamiltoniano que define a probabilidade de transição do estado inicial para o estado excitado. Desta forma, faremos uso de estruturas eletrônicas determinadas pelo método DFT/LDA+U e de um código desenvolvido pelo pesquisador Yves Joly (Institut Néel, Grenoble, França) para calcular espectros de XAS e XMCD como função da contração na rede cristalina induzida por altas pressões. Além de ajudar a interpretar os espectros experimentais, essas simulações também serão de grande importância para entender as propriedades magnéticas, condutoras e ópticas dos materiais.

#### Referências:

- [1] N. M. Souza-Neto et al., Phys. Rev. Lett. 102, 057206 (2009).
- [2] D. Haskell et al., High Pressure Research 28, 185 (2008).
- [3] M. A. Laguna-Marco et al., Phys. Rev. Lett. 105, 216407 (2010).