

“Desenvolvimento de instrumentação para estudo de supercondutores à base de H₂ sob altas pressões”

Orientador: Dr. Narcizo Marques de Souza Neto

Coorientador: Dr. Ricardo Donizeth dos Reis

Instituição: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS)

1. Introdução e estado da arte

Materiais classificados como supercondutores conduzem eletricidade sem nenhuma resistência (perda de energia) abaixo de determinada temperatura crítica (T_c). Uma segunda característica destes materiais é que quando abaixo da temperatura crítica eles não permitem a penetração de campo magnético em seu interior, em outras palavras, eles repelem o campo magnético - este efeito é conhecido como efeito Meissner e está ilustrado na figura 1. Desde a descoberta em 1911 de que em temperaturas mais baixas que 4 K o Mercúrio conduzia eletricidade sem nenhuma resistência, se tornava um supercondutor, a busca por mecanismos que permitam aumentar essa temperatura de transição (T_c) de modo a aumentar o potencial de aplicabilidade deste fenômeno, é o objetivo principal dos cientistas desta área. A aplicação de pressão pode aumentar/diminuir instabilidades estruturais (presentes em todos os materiais supercondutores de alta T_c) promovendo variações nas propriedades básicas que determinam a supercondutividade em um material (a densidade eletrônica no nível de Fermi, $N(E_F)$, a frequência de vibração dos fônons e a constante de acoplamento entre elétrons e fônons).

O objetivo final nesta área é produzir um material que seja supercondutor a temperatura ambiente. Isto aumentaria drasticamente a eficiência da geração e transmissão de eletricidade e faria os usos atuais de supercondutividade, como os ímãs para equipamentos de ressonância magnéticas, muito mais simples.

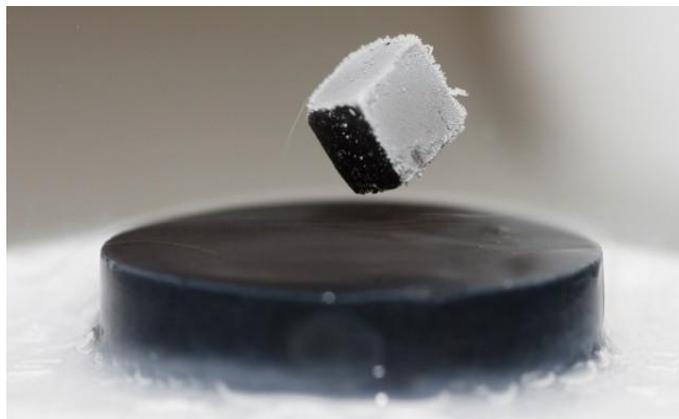


Figura 1. Efeito Meissner. Um material supercondutor é colocado próximo a um material magnético (ímã) e então como o material supercondutor não permite a penetração das linhas de campo os materiais se “repelem”.

Em supercondutores convencionais as vibrações na rede cristalina de um material ligam elétrons em pares os quais podem fluir sem resistência (Pares de Cooper). Em princípio, considera-se que os elementos mais leves são melhores candidatos a se tornarem supercondutores porque os seus átomos podem vibrar em frequências mais altas, facilitando a supercondutividade a temperaturas mais elevadas. Nesse sentido, alguns materiais como o Hidrogênio foram teoricamente preditos por poder apresentar uma fase supercondutora a elevadas temperaturas, até mesmo a temperatura ambiente [1], no entanto experimentalmente a temperatura crítica mais elevada alcançada até recentemente entre os materiais leves era a de 39 K no diboreto de magnésio MgB_2 , que é bastante inferior à temperatura de 164 K reportada para os óxidos de Cu, que no entanto não são supercondutores convencionais e que tem os seus mecanismos de pareamento ainda sobre constante discussão.

O estudo do hidrogênio acontece por vários motivos que vão muito além da supercondutividade. A primeira delas é que existe hidrogênio em todas as partes do universo. Estima-se que 75% de toda a matéria que conhecemos seja formada por Hidrogênio. Além disso, cientistas tem sempre olhado com muito interesse em átomos de H₂, por que

eles são os elementos mais simples que conhecemos (apenas 1 próton e 1 elétron). Acredita-se que o estudo de Hidrogênio tenha potencial de nos ajudar a elucidar os momentos mais primitivos do surgimento do universo em que vivemos, antes dos outros átomos começarem a se formar e deixarem tudo mais complicado.

Uma das coisas que aprendemos com o estudo do hidrogênio é que, no estado sólido, é suposto que este comporte-se como um metal alcalino - com um único elétron de valência livre, e desta forma esperamos que ele atue como outros metais com uma carga +1. No entanto, até o último ano o comportamento metálico do Hidrogênio nunca havia sido observado experimentalmente, não importando o quão grande seja a força para pressioná-lo ou a temperatura que ele tenha sido esfriado. Esse cenário mudou no começo do ano de 2017, quando quase um século depois de ter sido previsto teoricamente, cientistas de Harvard aparentemente conseguiram criar o material mais raro - e potencialmente um dos mais valiosos do planeta (2), o hidrogênio atômico metálico. Para criá-lo, os pesquisadores aplicaram pressões de 495 GPa (4,95 milhões de atmosferas) em uma pequena amostra de hidrogênio. Nessa condição de pressão extrema moléculas de hidrogênio fortemente ligadas se dissociam e se transforma em um arranjo atômico Hidrogênio, o qual é um metal. Além desta exuberante descoberta, os cientistas de Havard também postularam que essa nova fase do Hidrogênio deva ser metaestável, o que significa que se você retirar a pressão, ela permanecerá metálica, similar ao que ocorre no caso dos diamantes que se formam a partir de grafite sob alta temperatura e pressão, mas continua a ser um diamante quando essa pressão e temperatura é removida.

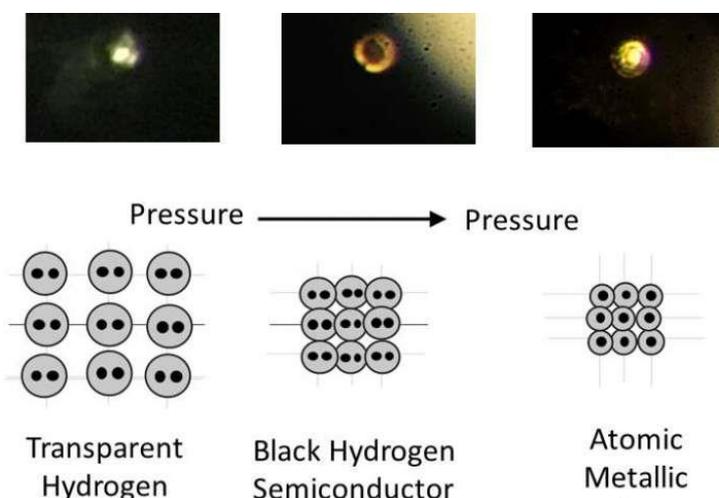


Figura 2. Fotos do hidrogênio gasoso sofrendo transições com o aumento da pressão. Vemos que o hidrogênio primeiros se transforma em uma molécula escura semicondutora e então finalmente atinge o estado atômico metálico. Figura adaptada da referência 2.

Dois anos antes da descoberta da nova fase metálica do H_2 , cientistas do *Max Planck Institute for Chemistry* em Mainz na Alemanha, tinham reportado o novo recorde de temperatura supercondutora estudando o sulfeto de Hidrogênio (H_2S) sob pressão [3]. Eles encontraram que o H_2S quando submetido a pressão de 150 GPa (1,5 milhões de atmosferas) se torna supercondutor a uma temperatura surpreendentemente alta de 203 K (-70 °C). Esse resultado além de ser muito superior ao previamente reportado para materiais com supercondutividade convencional, pela primeira vez apresenta um material que se transforma supercondutor a uma temperatura superior a mínima temperatura já observada na superfície da Terra (-89.2 °C ou 184 K). Os pesquisadores deste trabalho acreditam que a supercondutividade observada é oriunda essencialmente dos átomos de hidrogênio presentes nesse composto. Como o átomo de Hidrogênio é o mais leve entre todos os elementos da tabela periódica, espera-se que os átomos de Hidrogênio oscilem com frequências mais altas do que qualquer outro íon. Como são essas vibrações de rede que determinam a supercondutividade convencional, espera-se que compostos ricos em Hidrogênio devam exibir as mais altas temperaturas de transição supercondutora. Além disso, ligações fortes entre átomos aumentam a temperatura em que o material se torna supercondutor. Essas condições são observadas no H_3S , que é o composto criado quando o H_2S é submetido a altas pressões. Um similar efeito é então esperado para ocorrer em outros compostos a base de H, tais como H_2Pt e H_3Ir .

Ambas descobertas descritas anteriormente têm potencial de mudar radicalmente a maneira como compreendemos o mundo. O nosso sistema de transporte poderia ser alterado para sistemas a base de levitação magnética, os carros

elétricos se tornariam mais eficientes e o desempenho de muitos dispositivos eletrônicos iria melhorar significativamente. Além disso, esses materiais poderiam trazer grandes melhorias na produção e armazenamento de energia, visto que supercondutores têm energia de resistência zero, seria possível armazenar correntes em bobinas supercondutoras, para então serem usados quando necessário.

As recentes descobertas de estados metálicos (H_2) e supercondutores (H_2S) em compostos à base de Hidrogênio geram a expectativa de que se obter um material supercondutor a temperatura ambiente seja apenas questão de tempo. No entanto, para de fato isso acontecer é preciso que se entenda melhor os mecanismos que regulam esses novos estados. Para isso é fundamental se conhecer as estruturas cristalinas e eletrônicas desses materiais sob condições extremas. Nesse projeto se propõe o desenvolvimento de instrumentação necessária (descritas na próxima seção) para a realização de experimentos de espectroscopia de absorção de Raio X e de difração de Raio X sob altas pressões para estudo das estruturas eletrônicas e cristalinas de materiais à base de hidrogênio, em particular H_2 e H_2S .

2. Objetivos, Perspectivas e Metodologia

Para se atingir as pressões extremas é necessário um espaço de amostra muito pequeno, uma vez que pressão é dado pela relação de força sobre a área. Com este requisito de amostras muito pequenas para os experimentos, muitas vezes os resultados relatados neste campo são muito controversos devido às limitações das capacidades tecnológicas de hoje em todo o mundo.

Com advento da nova fonte de Luz Síncrotron de 4ª geração (Sirius) em construção em Campinas, poderemos oferecer capacidades inigualáveis para elucidar questões abertas no campo de materiais sob condições extremas. Além disso, para alcançar esses resultados um processo crítico é o carregamento de materiais gasosos (alguns deles tóxicos) sob alta pressão em uma célula de bigornas de diamante (DAC). Uma maneira de fazer isso é usando métodos criogênicos para aprisionar o gás dentro do DAC para os experimentos. Aqui, propomos que o estudante desenvolva um carregador criogênico de alta tecnologia para amostras gasosas para a realização de experimentos de alta pressão. Este projeto envolverá a concepção técnica, definição de estratégias criogênicas e de confinamento adequadas, usinagem do dispositivo com alta precisão mecânica e posterior comissionamento. Após esse comissionamento pretendemos realizar medidas de difração e espectroscopia de absorção de raio X sob pressão na linha luz XDS do LNLS.

O desenvolvimento desta nova instrumentação irá expandir significativamente a capacidade de realização de experimentos sob condições extremas no atual laboratório Nacional Síncrotron (LNLS) bem como na nova fonte de Luz Síncrotron (Sirius). Além disso, o sucesso deste projeto irá prover importante avanços no entendimento dos mecanismos que governam a supercondutividade em materiais a base de hidrogênio.

3. Cronograma

1º trimestre: Familiarização/treinamentos com os softwares de desenho técnico. Treinamento para a manipulação de células de pressão de diamantes.

2º trimestre: Desenvolvimento do projeto do sistema criogênico para carregamento de amostras gasosas.

3º trimestre: Acompanhar o processo de fabricação das peças do novo dispositivo. Estudo das técnicas de difração e espectroscopia de absorção de Raio-X.

4º trimestre: Comissionamento do novo dispositivo. Realização de experimentos de difração e espectroscopia de absorção de Raio-X como função da pressão na linha de luz XDS do LNLS.

4. Bibliografia

1. N. W. Ashcroft, Physical Review Letters 21(26), 1748-1749 (1968)
2. R. Dias and I. F. Silvera, Science, 26-Jan 2017
3. A. P. Drozdov et al, Nature 525,73–76 (2015)