

“Isolantes topológicos sob condições extremas”

Orientador: Dr. Ricardo Donizeth dos Reis

Coorientador: Dr. Narcizo Marques de Souza Neto

Instituição: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS)

1. Introdução e estado da arte

Materiais topologicamente protegidos têm despertado um grande interesse nos últimos anos por combinarem a possibilidade de apresentar fenômenos físicos exóticos com grande potencial de aplicação^{1,2}. Esses estados topológicos foram inicialmente observados em materiais com 2 dimensões (Grafeno), e mais recentemente foram identificados em materiais com 3 dimensões (3D), nos materiais chamados semimetais Weyl (WSM)^{3,4}. Em ambos os casos estes estados metálicos topologicamente protegidos despertam grandes interesses pela possibilidade real de aplicação para novas tecnologias em spintrônica e/ou computação quântica⁵.

O Prêmio Nobel do ano passado destacou o papel da topologia nas propriedades de sistemas eletrônicos. Este assunto foi bastante proeminente nos anos 80 com a descoberta do efeito Hall quântico por Klaus von Klitzing e colaboradores e pelo qual von Klitzing levou o Prêmio Nobel em 1985. O efeito Hall quântico (QHE) é caracterizado pela quantização da condutância de um “gás de elétrons” bidimensional na presença de um campo magnético ortogonal aplicado ao plano do gás. Uma particularidade importante é que o interior do sistema permanece com um gap de energia em seu espectro, uma característica típica de isolantes. Ainda assim, o transporte eletrônico ocorre devido à presença de estados metálicos na borda do sistema com uma orientação específica de circulação (“quiralidade”) que aparece devido à quebra da simetria de reversão temporal pelo campo magnético externo. Ou seja, é um sistema estranho: nem totalmente isolante, nem, de fato, um metal. Em outras palavras, são isolantes volumétricos (“bulk”) mas apresentam condução por estados de borda quirais.

Os compostos conhecidos como Heusler (cerca de cinquenta compostos dessa família foram previstos como possíveis isolantes topológicos) se destacam por apresentarem não apenas as fases topológicas mas também diversos outros exóticos estados fundamentais; tais como ferrimagnetos compensados, ferromagnetos semi-metálicos, supercondutores não convencionais e materiais com efeito Hall anômalo⁶. Embora as causas de muitos desses estados não convencionais não sejam totalmente compreendidas, existe um consenso que esta variedade de estados fundamentais está diretamente relacionada com a capacidade dos materiais se formarem em mais de um tipo de estrutura cristalina.

Os WSM tem despertado grande interesse dentro da comunidade desde a sua primeira observação experimental na família de compostos TaAs no ano de 2015⁷. Os WSM podem ser entendidos como um análogo tridimensional (3D) do grafeno, no qual as bandas de condução e de valência se dispersam linearmente no espaço dos momentos e se tocam em pontos, chamados pontos de Weyl⁸. Esses pontos de Weyl agem como monopolos magnéticos no espaço dos momentos e irão sempre existir em pares (Veja figura 2). Além disso os pontos de Weyl podem ser entendidos como fontes ou rebedores da curvatura de Berry. Esses semi-metais topológicos apresentam estados gapless com elétrons com massa relativística o que faz deles bons candidatos para apresentarem alta mobilidade, que é uma propriedade chave para se produzir um dispositivo de grande eficiência.

Outro aspecto interessante com respeito aos WSM, é que os Weyl elétrons geralmente coexistem com elétrons normais de forma que pequenas mudanças da energia de Fermi podem, em princípio, modificar a topologia da

superfície de Fermi uma vez que nesses materiais a densidade de portadores de carga é extremamente pequena⁹. Assim, é interessante investigar com detalhes como as posições pontos de Weyl é alterada quando submetida a pressões tão altas quanto 50 GPa e como essas alterações afetam as propriedades estruturais, eletrônicas e magnéticas destes materiais.

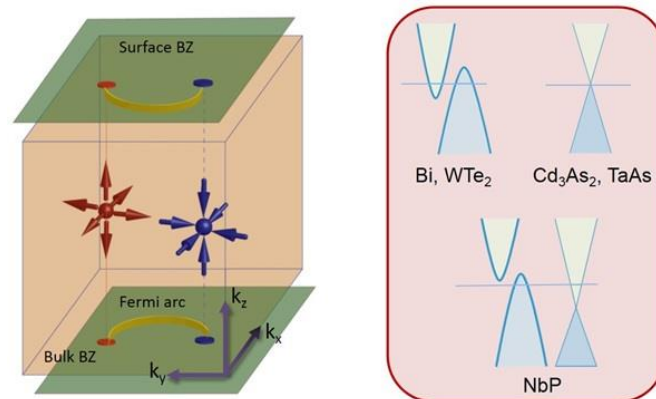


Figura 2. Direita; Ilustração dos pontos de Weyl e dos arcos de Fermi de um WSM. Esquerda: Ilustração esquemática dos diferentes tipos de semimetais em alguns materiais representativos. No caso de Bi, WTe, temos um semimetal normal com a coexistência dos pockets de elétrons e buracos. Para os compostos de Cd_3As_2 e TaAs temos a representação de um típico material classificado como Dirac. Para o caso do NbP, temos um semimetal com pocket de buracos oriundo de uma banda quadrática normal e um pocket de elétron associado a banda linear do semi-metal Weyl de NbP. Figura adaptada da referência ¹⁰

2. Objetivos e Perspectivas

Estudar como a pressão física afeta as estruturas eletrônica e cristalina dos isolantes topológicas do tipo Heusler. Iremos nos concentrar na família de compostos RPtBi (R = terra raras). Pretendemos realizar experimentos de resistividade, XMCD, XAS e XRD sob altas pressões para estudar as propriedades estruturais, eletrônicas e magnéticas dessa família de materiais como função da contração da rede cristalina. Além disso, com esse projeto teremos a oportunidade de investigar como a posição em relação ao nível de Fermi dos pontos de Weyl é afetada pela aplicação de pressão e como esta mudança afeta as propriedades macroscópicas desses materiais. O conjunto de resultados decorrentes deste projeto irá nos permitir elucidar algumas das propriedades ainda não entendidas nessa família de compostos, como o efeito da anomalia chiral (magnetoresistência negativa), bem como nos ajudar a prever as condições ideais para a otimização das propriedades de transporte desses materiais.

Com os dados de estrutura cristalina que serão obtidos nesse projeto, cálculos teóricos de primeiros princípios serão realizados para auxiliar na interpretação dos dados experimentais e prever o comportamento dos pontos de Weyl. Esses cálculos serão feitos pelo grupo do Dr. Yan Sun do Max Planck Institute de Dresden que é um dos colaboradores envolvidos nesse projeto.

3. Metodologia

Neste plano propomos o estudo dos efeitos da pressão nas propriedades eletrônicas e estruturais de isolantes topológicos da família RPtBi (R = terras raras), através das técnicas de XAS, XMCD, XRD. O LNLS atualmente dispõe de infraestrutura capaz de realizar os experimentos de XRD e XMCD como função da pressão hidrostática,

no entanto, espera-se que o estudante se envolva no aperfeiçoamento destas instrumentações. Além disso pretendemos comissionar uma nova instrumentação baseada em piezoelétricos para a realização de experimentos sob pressão uniaxial. As amostras utilizadas neste projeto serão fornecidas pelo grupo do Dr. Claudia Felser do *Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids* de Dresden na Alemanha.

4. Cronograma

A execução deste projeto envolve a realização de experimentos sob pressão que são extremamente desafiadores e por isso envolverão uma grande dedicação do estudante. A realização deste projeto irá ocorrer em parceria com alunos de pós-graduação de nosso grupo, o que deve acelerar o desenvolvimento do estudante iniciação científica.

1º trimestre: Estudar as técnicas de experimentais que serão utilizadas para realização do projeto (XAS, XMCD, XRD). Treinamento para preparação de células de pressão de diamante.

2º trimestre: Realização dos primeiros experimentos de XRD e XMCD nas linhas de luz do LNLS. Comissionamento de um novo arranjo experimental para a realização de experimentos sob pressão uniaxial.

3º trimestre: Realização de experimentos de XRD e XMCD sob pressão uniaxial nas linhas de luz do LNLS. Análise dos dados dos experimentos realizados sob pressão hidrostática.

4º trimestre: Conclusão dos experimentos, análise de dados, redação de artigos científicos e participação em eventos.

5. Bibliografia

¹ Hasan M. Z., Kane C. L., *Colloquium: Topological insulators*. Rev. Mod. Phys. 82, 3045 (2010).

² Ando Y., *Topological insulator materials*. J. Phys. Soc. Jpn. 82, 102001 (2013).

³ N. M. Souza-Neto et al., *Phys. Rev. Lett.* 102, 057206 (2009).

⁴ S.-M. Huang et al., *Nat. Commun.* 6, (2015).

⁵ H. Lin et al., *Nat. Mater.* 9, 546 (2010).

⁶ S. Chadov et al., *Nat. Mater.* 9, 541 (2010).

⁷ S. M. Huang, et al. *Nature Communications* 6, Article number: 7373 (2015)

⁸ C. Shekhar, et al. *Nature Physics* 11, 645–649 (2015)

⁹ R. D. dos Reis, et al. *Physical Review B* 93, 205102 (2016)

¹⁰ F. Arnoldo, et al. *Nature Communications* 7, 11615 (2016)