

Desenvolvimento de Instrumentação para Caracterização Óptica do H₂ Metálico

Orientador: Fábio Machado Ardito

Co-orientador: Narcizo Marques de Souza Neto

Instituição: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

1. Introdução e Estado da Arte

O hidrogênio é o elemento mais abundante do universo e estima-se que componha 75% de toda a matéria existente. Além disso, ele é átomo mais simples que conhecemos, contendo apenas 1 próton e 1 elétron. Devido ao fato de ser o elemento predominante no universo e estar associado aos processos de geração de energia nas estrelas, torna-se evidente que o estudo de Hidrogênio é fundamental para elucidar os momentos mais primitivos do surgimento do universo em que vivemos, quando os processos de fusão nuclear ainda não haviam criado toda a complexidade do universo atual. Contudo, o estudo deste elemento levou à hipótese de que, no estado sólido, ele se comporte como um metal alcalino - com um único elétron de valência livre, e desta forma espera-se que ele atue como outros metais com uma carga +1 [1]. Dentre as propriedades mais importantes previstas para este material estão a possibilidade de supercondutividade a altas temperaturas, cujas aplicações são evidentes, e uma alta densidade de energia armazenada nas ligações entre os átomos, que o tornaria um combustível sem concorrentes no mundo atual.

No entanto, até 2016 a fase metálica do Hidrogênio nunca havia sido observada experimentalmente, não importando o quão grande fosse a pressão aplicada ou a temperatura que ele tenha sido resfriado. Este cenário mudou no começo de 2017, quando cientistas de Harvard alegaram ter conseguido criar o hidrogênio atômico metálico, submetendo uma amostra de hidrogênio de 10 microns de diâmetro a pressões de até 495 GPa (4,95 milhões de atmosferas) criadas numa célula de bigornas de diamante. Nessa condição, as moléculas de hidrogênio fortemente ligadas se dissociam e se transformam em um arranjo atômico que se torna um metal, como na Figura 1. Além desta exuberante descoberta, os cientistas de Harvard postularam que essa nova fase do Hidrogênio possa ser metaestável, o que significa que, quando retirada a pressão, ela permanecerá metálica, apresentando, portanto, uma transformação irreversível. Entretanto, este trabalho vem sendo o assunto de uma acalorada discussão científica e despertou um forte ceticismo pelo fato de faltarem evidências experimentais contundentes da formação da fase metálica do hidrogênio, além de questionamentos a respeito da pressão máxima atingida, que, neste caso, foi estimada, mas não aferida. Neste trabalho, as medidas de refletividade foram realizadas com a câmera de um *smartphone* [3].

Deste exemplo, se vê claramente que, no campo de física de condições extremas, existem dois desafios a serem continuamente vencidos: a criação de ambientes confinados e controlados com

pressões e temperaturas extremas, tanto altas quanto baixas, e o estudo experimental dos materiais sujeitos a estas condições. Dentre as técnicas que se têm interesse, cabe destacar a difração de raios-X, que dá enfoque à estrutura cristalina, e a espectroscopia Raman, que fornece informações sobre a dinâmica das vibrações da rede cristalina e também pode ser utilizada para a medição da pressão através da linha espectral característica do diamante. Neste sentido, uma fonte de luz síncrotron é uma grande ferramenta na exploração destes cenários, pois permite a implementação de técnicas poderosas de investigação científica.

Dentre os métodos usados para criar ambientes de altas pressões, um dos mais empregados é a célula de bigorna de diamante (DAC, ou *Diamond Anvil Cell*), que foi o método usado para a criação do hidrogênio metálico [2]. As principais vantagens desta técnica são o fácil acesso óptico tanto do espectro visível quanto de raios-X e um espaço confinado em condição estática, possibilitando que várias técnicas sejam integradas sem a necessidade de se recorrer a experimentos temporalmente resolvidos, além de atingir pressões elevadíssimas sem acarretar as altas temperaturas inerentes aos métodos dinâmicos como ondas choque criadas com lasers pulsados de alta potência, uma condição essencial para a síntese da fase metálica do hidrogênio.

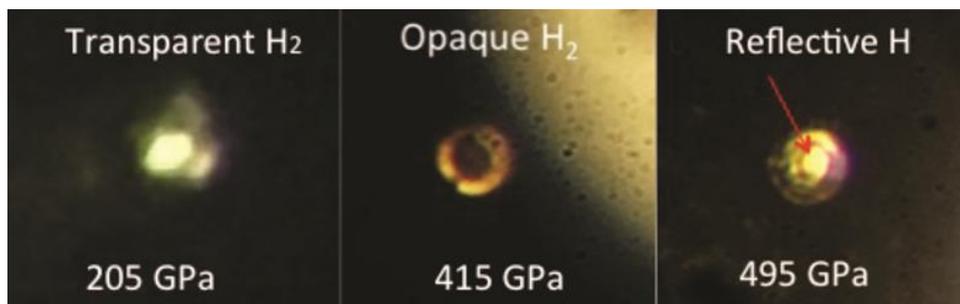


Figura 1. Fotos do hidrogênio gasoso sofrendo transições com o aumento da pressão. Vemos que o hidrogênio primeiro se transforma em um material escuro semiconductor e então finalmente atinge o estado atômico metálico. Figura adaptada da referência 2.

Por outro lado, uma das principais vantagens das fontes de luz síncrotron de quarta geração, como o Sirius, é a possibilidade de obter feixes de raios-X altamente focalizados de até dezenas de nanômetros de diâmetro. Com isto, pode-se reduzir consideravelmente o tamanho da amostra, permitindo atingir pressões muito mais elevadas do que temos atualmente disponível, além de possibilitar experimentos com alta resolução espacial. Com isso, abre-se um campo de estudo no qual pequenas regiões dentro do ambiente confinado de uma célula de pressão, da ordem de microns, possam ser investigadas detalhadamente.

2. Objetivos e Metodologia

O principal objetivo deste projeto é desenvolver a instrumentação que possibilite o monitoramento *in situ* de amostras em condições extremas de pressão e temperatura, com alta

resolução espacial e a formação de um cientista qualificado que possibilite vencer os desafios instrumentais para a síntese e caracterização de hidrogênio metálico. Devido à amostra ser um gás altamente reativo, métodos de caracterização por transporte eletrônico, ainda mais nestas condições, são extremamente difíceis. Por este motivo, as técnicas de caracterização óptica são preferidas. Para isso, será desenvolvido um microscópio de espectro visível capaz de fazer aquisição de imagens e vídeos em alta resolução e que possibilite espectroscopia com luz visível, como Raman, fluorescência, transmitância, etc; dentro da linha de luz com experimentos empregando DACs.

Para tal, será necessário o desenvolvimento de componentes opto-mecânicos, automação, procedimentos de alinhamento e acompanhamento de experimentos de usuários. Cabe ressaltar que a maior parte do material necessário já se encontra disponível no Laboratório de Altas Pressões do LNLS. Além disso, estas técnicas poderão ser utilizadas por todos os usuários da linha de luz, abrangendo um amplo espectro de problemas científicos além do hidrogênio metálico.

3. Cronograma

Este é um projeto bastante desafiador do ponto de vista instrumental, uma vez que consiste em integrar muitos elementos ópticos e mecânicos junto a outros experimentos já existentes e realizar técnicas complexas e delicadas. Envolverá o desenvolvimento e a fabricação de componentes, além de dimensionamento e estudo dos componentes já existentes no laboratório.

1° Trimestre: Apresentação aos sistemas já existentes, treinamento em procedimentos e estudo dos conceitos fundamentais de óptica e espectroscopia e das técnicas de altas pressões envolvendo células de bigornas de diamante (DAC).

2° Trimestre: Desenvolvimento conceitual de um sistema de microscopia e espectroscopia de alta resolução espacial para a linha de luz.

3° Trimestre: Implementação e comissionamento do sistema, primeiros experimentos e testes de conceito.

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

4. Bibliografia

1. N. W. Ashcroft, Physical Review Letters 21(26), 1748-1749 (1968)
2. R. Dias and I. F. Silvera, Science, 26 - (2017)
3. D. Castelvich, Physicists doubt bold report of metallic hydrogen, Nature News 26 jan 2017.