Usando espectroscopia de raios-X para estudar multicamadas de óxidos multiferroicos

Pesquisador responsável: **Julio Criginski Cezar** (julio.cezar@lnls.br)

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron/LNLS
Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais/CNPEM

Introdução

Esse trabalho de IC tem como objetivo estudar materiais **multiferroicos** por **espectroscopia de absorção de raios-X**. Não sabe o que são multiferroicos nem o que é absorção de raios-X? Então esse projeto é pra você! Segue lendo... É bem provável que você conheça os materiais **ferromagnéticos**, certo? São os imãs permanentes, que ficam magnetizados mesmo sem a presença de um campo magnético externo. Dizemos que os **ferromagnetos desenvolvem um magnetismo espontâneo**. E você conhece os **ferroelétricos**? Por analogia, podemos dizer que os ferroelétricos são materiais que **desenvolvem uma eletrização espontânea**. Se uma régua de plástico fosse ferroelétrica não precisaria esfregar no cabelo pra ela atrir pedacinhos de papel... Apesar de serem menos conhecidos que os ferromagnéticos, os ferroelétricos também têm grande importância tanto do ponto de vista de física básica quando aplicada. Por exemplo, da mesma forma que temos memórias magnéticas para uso em informática, temos também as ferroelétricas (ver referência [1]).

Mas temos também a possibilidade de um mesmo material ser ferromagnético e ferroelétrico. Nesse caso o material é chamado **multiferroico**. São situações pouco comuns e a busca por sistemas multiferroicos é uma atividade intensa em ciência dos materiais. Ainda mais incomuns são os casos de materiais multiferroicos onde a parte ferromagnética e ferroelétrica interagem. Nesse caso os materiais além de multiferroicos são também **magnetoelétricos**. *Alerta de spoiler: um material não precisa ser multiferroico pra ser magnetoelétrico...*

Nesse trabalho de iniciação científica buscamos entender um pouco melhor os mecanismos que podem levar à interação magnetoelétrica particularmente em óxidos de metais de transição. A esse respeito vale a pena ressaltar que óxidos são um terreno muito fértil para estudar a matéria, uma vez que praticamente sempre existe um óxido com a propriedade que estamos interessados. Lembre-se que a água é um óxido! Para ter uma ideia da importância de óxidos no caso de multiferroicos veja a figura 1. Para os

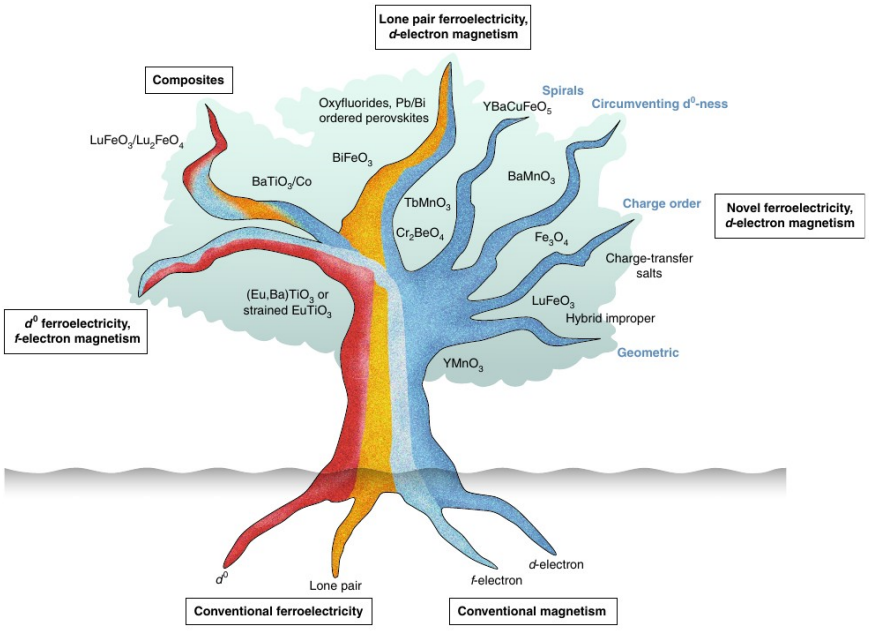

Fig 1. “Árvore genealógica dos multiferroicos” a partir da referência [2]. Note que todos os exemplos são óxidos! A técnica de absorção de raios-X pode ajudar a entender a origem do magnetismo e da ferroeletricidade.

objetivos desse trabalho pretendemos estudar dois tipos de materiais multiferroicos: i) aqueles que chamamos **multiferroicos intrínsecos**, onde o mesmo material é tanto ferroelétrico quanto ferromagnético; ii) **multiferroicos extrínsecos**, que nada mais são que dois tipos de óxidos, cada um com uma das propriedades de interesse, colocados juntos para ‘simular’ um material único multiferroico. Mas não imagine que ‘extrínseco’ aqui é pejorativo. De forma alguma! São justamente os multiferroicos extrinsecos que apresentam grande desafios e possibilidades.

Para estudar esses materiais vamos usar principalmente a técnica de **absorção de raios-X**, que é uma técnica de **luz síncrotron**. Essa técnica permite obter informação sobre cada elemento químico que compõe a amostra. Nesse sentido temos duas frentes de trabalho. Uma é a medida de absorção de raios-X em si usando os instrumentos disponíveis no síncrotron SIRIUS do LNLS. Dada a situação sanitária que passamos, é provável que ainda demoremos para poder fazer essas atividades experimentais. Por isso temos uma segunda frente de trabalho que se trata da análise de dados de absorção de raios-X, usando o que chamamos de teoria de multipletos. Certamente durante o início desse projeto, essa será a principal atividade, simulando espectros de absorção de raios-X de medidas já realizadas, para quantificar por exemplo o momento magnético de cada elemento químico que compõe a amostra. A teoria de multipletos é uma extensão da teoria de combinação linear de orbitais atômicos e nos permite simular quais energias os elétrons podem ocupar dentro de um determinado átomo do material. A técnica de absorção de raios-X é muito sensível a esses níveis de energia e comparando os resultados experimentais com a simulação esperamos poder descrever a estrutura de energias dos elétrons nos materiais multiferroicos. Isso é chamado de **investigar a estrutura eletrônica** do material. Praticamente todas as propriedades de qualquer material pode ser descrita pela estrutura eletrônica do mesmo.

Estado da arte

No que diz respeito ao tipo de amostra, estamos interessados em multicamadas onde os materiais ferroelétrico e ferromagnético são depositados de forma alternada sobre um suporte. A espessura dessas camadas é da ordem de poucas dezenas de nanômetros, o que privilegia a interação entre as camadas, eventualmente dando origem ao acoplamento magnetoelétrico. Por outro lado a teoria de multipletos é bem estabelecida e utilizaremos softwares disponíveis na comunidade de absorção de raios-X para esse cálculo.

Objetivos

Realizar simulação de multipletos para interpretar espectros de absorção de raios-X do elemento titânio, manganês e oxigênio em multicamadas dos óxidos $BaTiO_3$ (titanato de bário) e $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ (manganita de lantânio e estrôncio). O titanato de bário é um material ferroelétrico e a manganita ferromagnético. A intenção é interpretar através de simulação de multipletos as variações observadas no comportamento macroscópico das amostras quando se variam as espessuras das camadas ferroelétricas e ferromagnéticas.

Metodologia

A pessoa selecionada para esse projeto se envolverá inicialmente nas simulações de multipleto de medidas de absorção de raios-X já disponíveis. Para isso utilizaremos o programa Crispy [3]. Antes de chegar a realizar as simulações será necessário estudar os fundamentos teóricos e experimentais da técnica de absorção de raios-X, em paralelo ao estudo sobre materiais multiferroicos-magnetoelétricos. Além do envolvimento nas simulações por multipletos, o trabalho também envolverá a parte experimental junto à linha SABIA do SIRIUS [4]. Essa atividade estará condicionada à melhoria nas condições da pandemia de COVID-19, que permitam o retorno às atividades presenciais no câmpus do CNPEM.

Referências

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Ferroelectric_RAM

[2] https://www.nature.com/articles/s41563-018-0275-2
(se não tiver acesso à essa referência)

[3] https://www.esrf.fr/computing/scientific/crispy/

[4] https://www.lnls.cnpem.br/facilities/sabia/