

## Utilizando raios X para estudar a estrutura eletrônica de materiais magnéticos

**Pesquisador responsável:** Thiago José de Almeida Mori

**Unidade:** Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

### INTRODUÇÃO

A compreensão das propriedades de transporte de cargas elétricas, especialmente em semicondutores como silício, permitiu que a microeletrônica se tornasse uma grande propulsora do desenvolvimento social e econômico desde a metade do século XX. Por sua vez, o estudo do micro e [nanomagnetismo](#) tem impulsionado importantes desenvolvimentos tecnológicos em áreas como gravação magnética, sensores e processamento de informação. O uso do spin do elétron como portador de informação, além da sua carga, é a grande revolução da chamada eletrônica de spin, ou [spintrônica](#), conceito que já está presente em equipamentos eletrônicos do nosso dia a dia. Uma outra proposta é utilizar [ondas de spin](#), excitações coletivas que também são chamadas de magnons (figura 1). A ideia central da [magnônica](#) é usar estas ondas magnéticas para transportar informação em tecnologias mais eficientes energeticamente - sem presença do fluxo dissipativo da carga do elétron como na eletrônica. A integração dessas áreas deu origem ao conceito da [magnon spintrônica](#) (figura 2), onde a informação transportada através de ondas de spin (magnônica) pode ser convertida em correntes de carga (eletrônica) e/ou de spin (spintrônica). O rápido avanço destas áreas de pesquisa ao longo das últimas décadas tem proporcionado a descoberta de diversos fenômenos microscópicos dependentes do spin. Além desta fenomenologia ser extremamente interessante para o desenvolvimento de novas tecnologias em áreas como computação quântica, telecomunicações e armazenamento de dados, também faz surgir novas questões fundamentais a serem respondidas em física da matéria condensada.

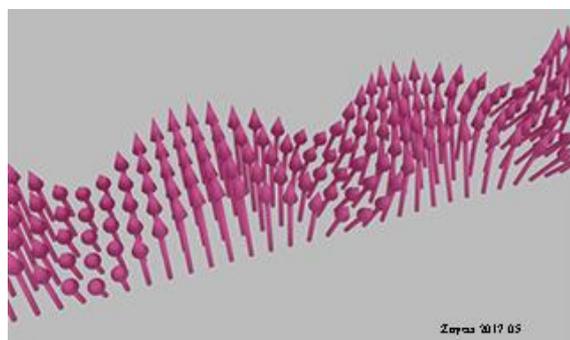


Figura 1: representação de uma onda de spin (magnon). Ref. [1].

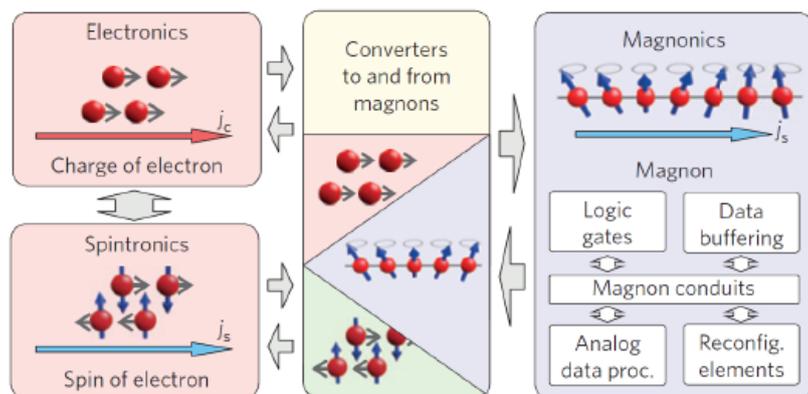


Figura 2: o conceito de magnon spintrônica. Ref. [2].

Para compreender esses fenômenos de um ponto de vista fundamental, precisamos analisar os mecanismos microscópicos que estão por trás deles, em diferentes tipos de materiais magnéticos. A forma mais adequada de fazer isso é olhar para a origem das interações eletrônicas do material, pois elétrons são os responsáveis por todas as propriedades macroscópicas que observamos. Neste contexto, a ideia central deste projeto é utilizar técnicas de espectroscopia de raios X para estudar as propriedades eletrônicas de diferentes tipos de materiais magnéticos, posteriormente as relacionando com as propriedades atômicas e estruturais de cada material. Este conjunto de informações é importante para ser contrastado com modelos teóricos que buscam explicar os novos fenômenos magnéticos que ainda não são totalmente compreendidos. Indo além, uma vez que conseguimos compreender as origens microscópicas dos fenômenos magnéticos, se torna muito mais fácil propor novos materiais com novas funcionalidades interessantes para aplicações em dispositivos de magnon spintrônica.

## OBJETIVOS

Através do estudo da estrutura eletrônica de alguns óxidos magnéticos não-convencionais, nós buscaremos explicar seus comportamentos magnéticos. Com isso, poderemos contribuir para a compreensão da origem microscópica de propriedades magnéticas interessantes como alta polarização de spin, modos de mágnons em altas frequências, “exchange bias” espontâneo, acoplamento magnetoelétrico, dentre outras. Neste contexto, verificaremos se é possível manipular propriedades atômicas e eletrônicas de um material magnético para que adquira funcionalidades interessantes para aplicações em dispositivos baseados em magnon-spintrônica.

## METODOLOGIA

Nós estudaremos alguns óxidos da família das manganitas com estrutura de perovskita, como o  $\text{La}_{0,67}\text{Sr}_{0,33}\text{MnO}_3$  - que é um óxido magnético muito interessante por apresentar boa condutividade elétrica e alta polarização de spin em temperatura ambiente, e o  $\text{La}_2\text{CoMnO}_6$  - que é uma perovskita dupla que pode apresentar “exchange bias” espontâneo quando dopada com cátions mais pesados no sítio do La. Na maioria destes óxidos complexos, o metal de transição 3d (Mn, Co) pode apresentar valência mista, ou seja, o mesmo tipo de átomo possui estrutura eletrônica diferente quando está posicionado em diferentes sítios da rede cristalina do óxido. Estudar de forma seletiva cada um destes íons é uma tarefa muito difícil do ponto de vista experimental. Nós buscaremos resolver este desafio através da combinação das técnicas de [espectroscopia de absorção de raios X](#) (XAS, “X-ray absorption spectroscopy”) e [espalhamento inelástico ressonante de raios X](#) (RIXS, “resonant inelastic X-ray scattering”), com suporte de simulações teórico-computacionais.



Figura 3: representação do espectrômetro RIXS da linha IPE do Sirius.

Iniciaremos o projeto com foco em realizar simulações teórico-computacionais para analisar algumas medidas experimentais de XAS já realizadas por outros membros do grupo, e para nos familiarizarmos com as técnicas e métodos de um ponto de vista teórico. Utilizaremos principalmente o método de cálculo de multipletos para simular o espectro de bordas de absorção L dos metais de transição 3d (Mn e Co). Na sequência, realizaremos simulações combinadas de espectros de XAS e RIXS para prever o resultado e planejar futuros experimentos a serem realizados. Finalmente, realizaremos medidas de XAS e RIXS em filmes finos das manganitas estudadas, resultados que serão analisados em conjunto com novas simulações computacionais. Os experimentos serão realizados no novo espectrômetro RIXS da linha IPE do Sirius (figura 3), que após a fase de comissionamento apresentará uma das melhores resoluções em energia do mundo.

## REFERÊNCIAS

- [1] [https://staff.aist.go.jp/v.zavets/spin3\\_47\\_exchange.html](https://staff.aist.go.jp/v.zavets/spin3_47_exchange.html). Acessado em 27/04/2020.
- [2] A.V. Chumak et al., Nature Physics 11, 453 (2015).