

Projeto PIBIC-CNPEM

Investigação da estrutura local de compostos Heusler (Mn_3X) sob deformação uniaxial: desenvolvimento e aplicação da técnica 3D- Δ PDF

Pesquisador responsável: Guilherme Calligaris
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS)
Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM)

Introdução e estado da arte

A habilidade de controlar a distância entre átomos é uma ferramenta fascinante que permite destacar propriedades de alguns materiais e promover fenômenos exóticos. Nesse contexto, deformação elástica permite a manipulação rápida e reversível do ordenamento local de átomos, e, portanto, é de bastante interesse no estudo de materiais funcionais sensíveis a tal perturbação externa. Um exemplo desses materiais são os compostos Heusler, que por conta da interação entre sua simetria, acoplamento spin-órbita e estrutura magnética, podem ser induzidos a apresentar, por exemplo, anomalia quiral, efeito Hall anômalo (AHE – *anomalous Hall effect*) e de spin (SHE – *spin Hall effect*), quando submetidos a forças externas^[1].

Particularmente na fase hexagonal do Mn_3Ge (Heusler tipo Mn_3X), os spins dos átomos de Mn têm configuração antiferromagnética (AFM) alinhados ao plano ab distantes de 120° (**Figura 1**). Nessa estrutura triangular (tipo Kagome), o magnetismo frustrado desses spins ainda produz um momento magnético residual que dita a sua quiralidade, que por sua vez resulta em um AHE^[2,3]. Nesse cenário, deformações uniaxiais podem alterar distâncias e ângulos de ligações entre íons magnéticos induzindo anisotropia magnética.

A Difração de Raios X (XRD – *X-ray Diffraction*), por sua vez, é conhecida como a técnica decisiva na investigação/determinação de estruturas atômicas por meio da análise dos “picos de Bragg”. Estes descrevem o ordenamento atômico de longo alcance, conhecido como “estrutura média” de cristais. No entanto, todo cristal “real” pode apresentar uma pequena alteração local (curto alcance), de qualquer natureza, que não é descrita pela difração de Bragg. Ao invés disso, eles contribuem para um fraco espalhamento conhecido como “Espalhamento Difuso” (DS – *Diffuse Scattering*)^[4,5]. Isso é particularmente atrativo no estudo de materiais em que suas propriedades de interesse dependem não somente de sua estrutura cristalina (longo alcance) mas têm relação essa “desordem” ou “flutuação” estrutural (curto alcance).

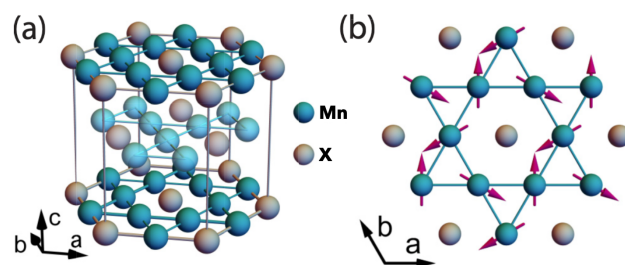


Figura 1 (a) Representação da estrutura cristalina (“estrutura média”) de composto Heusler Mn_3X . (b) Vista de um plano ab mostrando a rede triangular (tipo Kagome) de Mn, com uma possível configuração de spins (setas roxas). (retirado de *Theuss et al.* 2022)

A Função de Distribuição de Pares (PDF – *Pair Distribution Function*)^[6] vem ganhando popularidade na análise de amostras policristalinas e nanopartículas. Entretanto, essa abordagem projeta toda informação 3D em um espaço 1D (distâncias **escalar** entre pares), o que pode dificultar uma análise completa por conta da superposição de intensidades. Essa dificuldade é superada com o uso da emergente técnica 3D- Δ PDF^[7,8], que representa diferenças com respeito a estrutura média utilizando distâncias **vetoriais** entre átomos. Exemplos de aplicação são estudos *i)* de rede de vacâncias em análogos de azul da Prússia^[9]; *ii)* da estrutura local do supercondutor de alta temperatura^[10] (**Figura 2**); *iii)* de via de difusão dinâmica em condutor superiônico^[11].

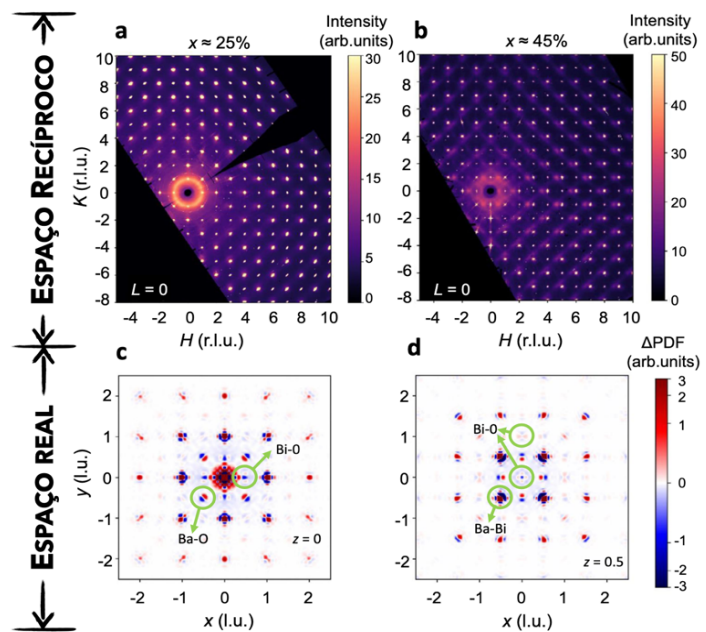


Figura 2 (a e b) Espalhamento difuso de raios X do plano $L=0$ (espaço recíproco) do sistema $Ba_{1-x}K_xBiO_3$ ($x \approx 25$ e 45% , isolante e metálico, respectivamente), mostrando diferentes padrões. 3D- Δ PDFs da amostra metálica mostrando o plano (espaço real) $z = 0$ (c) e $z = 0.5$ (d) com os picos das distâncias vetoriais das ligações Ba-O, Ba-Bi, e Bi-O em destaque. (retirado de *Griffit et al.* 2023)

Objetivos

De forma geral, este projeto espera integrar o aluno(a) ao ambiente do LNLS e seus desafios instrumentais e científicos, e dessa forma motivá-lo(a) a:

- ▶ participar de experimentos focados em difração e espalhamento difuso de raios X de Mn_3Ge , combinado com aplicação de deformação uniaxial *in situ*, e dessa forma avançar na investigação da estrutura local e sua possível relação com AHE utilizando 3D- Δ PDF;
- ▶ contribuir no desenvolvimento de ferramental computacional para conversão de imagens entre espaços recíproco e real, e outros tratamentos (normalização, fusão de dados, remoção de artefatos, etc.) que levem em consideração específicas da infraestrutura disponível na linha de luz EMA do Sirius;

Metodologia

Monocristais de Mn_3Ge serão submetidos a deformação uniaxial (**Figura 3**) em diferentes direções cristalográficas para investigar sua a

influência na estrutura local. Para isso, medidas de difração e espalhamento difuso de raios X (**Figura 2**) serão utilizados para permitir a abordagem da 3D- Δ PDF nesse sistema e então correlacionar esses resultados com medidas de transporte e efeito Hall anômalo.

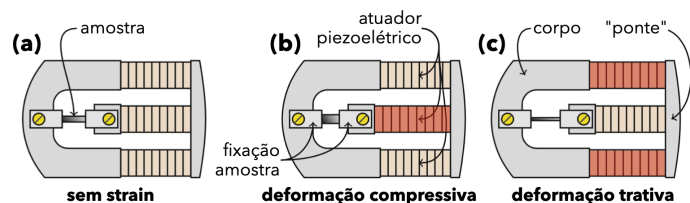


Figura 3 representação da célula de tensão uniaxial e atuadores piezoelétricos sem *strain* (a) e induzindo uma deformação (b) compressiva e (c) trativa.

Público-alvo

Este projeto foi pensado para alunos de graduação em Física e afins (e.g. Química, Eng. Física, etc). Conhecimento em programação em Python ou similares é bem-vindo.

Cronograma de atividades

ATIVIDADES	09-10 /2023	11-12 /2023	01-02 /2024	03-04 /2024	05-06 /2024	07-08 /2024
Estudo e revisão bibliográfica						
Ambientação, desenvolvimento, testes, e emprego de ferramentas computacionais						
Treinamento e montagem de células de deformação uniaxial						
Experimentos de XRD em amostras sob pressão uniaxial						
Análise de dados						
Preparação do relatório final						

Referências Bibliográficas

- [1] K. Manna, Y. Sun, L. Muechler, J. Kübler, C. Felser, *Nat Rev Mater* 2018, 3, 244.
- [2] R. D. dos Reis, M. G. Zavareh, M. O. Ajeesh, L. O. Kutelak, A. S. Sukhanov, S. Singh, J. Noky, Y. Sun, J. E. Fischer, K. Manna, C. Felser, M. Nicklas, *Phys Rev Mater* 2020, 4, 051401.
- [3] F. Theuss, S. Ghosh, T. Chen, O. Tchernyshyov, S. Nakatsuji, B. J. Ramshaw, *Phys Rev B* 2022, 105, 174430.
- [4] D. A. Keen, A. L. Goodwin, *Nature* 2015, 521, 303.
- [5] H.-B. Bürgi, *Acta Crystallogr Sect B* 2022, 78, 283.
- [6] E. Takeshi, S. J. L. Billinge, *Pergamon Mater Ser* 2012, 16, DOI 10.1016/b978-0-08-097133-9.00001-0.
- [7] T. Weber, A. Simonov, *Zeitschrift Für Kristallographie* 2012, 227, 238.
- [8] N. Roth, B. B. Iversen, *Acta Crystallogr A* 2019, 75, 465.
- [9] A. Simonov, T. D. Baerdemaeker, H. L. B. Boström, M. L. R. Gómez, H. J. Gray, D. Chernyshov, A. Bosak, H.-B. Bürgi, A. L. Goodwin, *Nature* 2020, 578, 256.
- [10] S. Griffitt, M. Spaić, J. Joe, Z. W. Anderson, D. Zhai, M. J. Krogstad, R. Osborn, D. Pelc, M. Greven, *Nat Commun* 2023, 14, 845.
- [11] N. Roth, B. B. Iversen, *lucry* 2023, 10, 199.