

Investigação de excitações quânticas na superfície de SrTiO₃ por espectroscopias de raios-X no Sirius

Pesquisador responsável: Tulio C. R. Rocha

Unidade: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

Introdução

Os polarons são excitações que se formam facilmente em materiais polarizáveis devido ao acoplamento de um excesso de carga local com vibrações da rede cristalina (figura1). O objeto quântico composto resultante pode ser identificado como uma quasipartícula consistindo em um elétron (ou um buraco) vestido por uma nuvem de fônons virtuais: um excesso de carga injetado em um sólido polarizável desloca os íons em sua vizinhança e cria uma nuvem de polarização que segue o portador de carga à medida que ele se propaga pelo cristal [1]. Essas quasipartículas se manifestam de muitas maneiras diferentes e têm um impacto profundo nas propriedades e funcionalidades dos materiais.

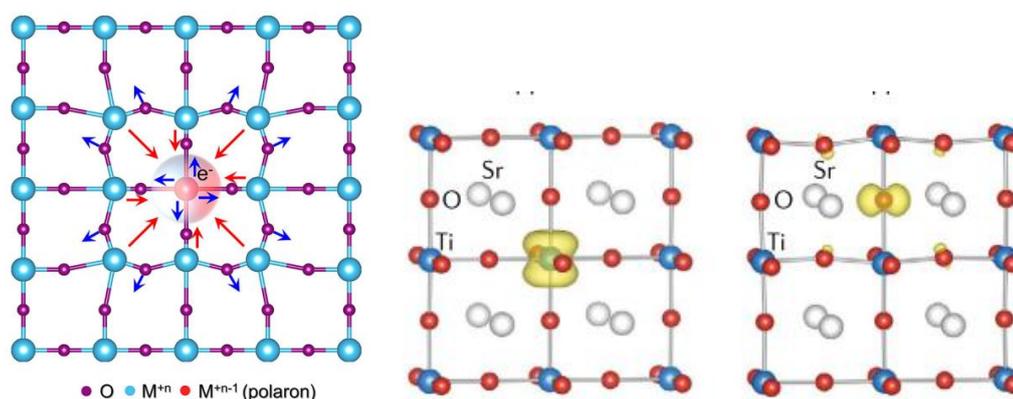


Figura 1. (esquerda) Ilustração esquemática da formação de um pólaron em uma estrutura idealizada de um óxido de metal de transição. O excesso de elétrons no em um átomo do metal central (vermelho) causa distorções na rede devido a interações repulsivas (setas azuis) e atrativas entre os átomos (setas vermelhas). (centro) Formação de polaron em SrTiO₃ pelo excesso de elétrons causado pela dopagem com Nb. (direita) Polaron em SrTiO₃ formado por buracos induzidos por vacâncias de oxigênio.

O titanato de estrôncio (SrTiO₃) é um óxido de metal de transição estrutura atômica simples e baixo grau de correlação na estrutura eletrônica, mas que apresenta propriedades de transporte, como resistividade e supercondutividade que ainda não foram totalmente compreendidas. As anomalias na condutividade eletrônica são atribuídas por diversos autores a presença de polarons que moldam a resposta dos elétrons a perturbações externas. Porém ainda não há consenso sobre a natureza desses polarons. Assim para compreender as propriedades macroscópicas do SrTiO₃ é necessária uma melhor compreensão da natureza de suas quasipartículas, em particular os polarons [2]. Neste projeto propomos investigar a formação de pólaron em um óxido de metal de transição, buscando a assinatura dessas quasipartículas com espectroscopias de raios-X

Estado da Arte

Polarons têm sido o campo de testes para o desenvolvimento de inúmeras teorias, e suas manifestações foram estudadas por muitas sondas experimentais diferentes. Porém novas técnicas experimentais baseadas em raios-X que emergiram em síncrotrons de 3ª e 4ª geração como o Sirius têm fornecido informações diretas sem precedentes sobre essas quase-partículas como: energia de formação, orbitais eletrônicos envolvidos, velocidade de propagação dentre outras.

Objetivos

Utilizar espectroscopias de raios-X na linha IPE do Sirius para sondar a estrutura eletrônica da superfície de monocristais de SrTiO₃ em busca de evidências experimentais da formação das quasipartículas quânticas conhecidas como pólarons.

Metodologia

Vamos investigar 3 conjuntos de amostras: 1) monocristais comerciais de STO puros, 2) monocristais dopados com Nióbio e 3) monocristais em que induziremos vacâncias de oxigênio por tratamentos térmicos. O dopante, Nb⁵⁺, substitui um íon Ti⁴⁺ e adiciona um elétron ao local. Por outro lado, a ausência de um átomo de oxigênio da rede, causa uma ausência de elétrons que pode ser descrita com uma carga positiva local (buraco).

Nos tratamentos térmicos vamos explorar variações na temperatura e tempo para gerar amostras com diferentes graus de deficiência em oxigênio. Para detectar e realizar uma análise qualitativa da quantidade de defeitos vamos estudar as alterações das propriedades ópticas e de transporte elétrico dos monocristais por meio de medidas de condutividade elétrica e absorção no ultravioleta-visível de defeitos induzidos.

Realizaremos experimentos na linha de luz IPE do Sirius utilizando as técnicas de Espectroscopia fotoelétrons excitados por raios-X (XPS) e espectroscopia de absorção de raios-X (XAS) nas ressonâncias do oxigênio e titânio para caracterizar a composição química e estrutura eletrônica da superfície dos monocristais e correlacionar com a quantidade de defeitos. Por fim, dependendo da qualidade dos resultados obtidos, vamos realizar experimentos de espalhamento inelástico ressonante de raios-X (RIXS) para sondar as excitações elementares de baixa energia na borda do oxigênio e buscar evidências diretas da formação de pólarons.

Referências

1. A. Geondzhian et al., Large polarons as key quasiparticles in SrTiO₃ and SrTiO₃-based heterostructures. *Phys. Rev. Lett.* **125**, 1–7 (2020).
2. 1. C. Franchini, M. Reticcioli, M. Setvin, U. Diebold, Polarons in materials. *Nat. Rev. Mater.* **0123456789** (2021), doi:10.1038/s41578-021-00289-w.