

PROJETO – DE – PESQUISA

Programa de Iniciação científica e Tecnológica CBPF

Nome do pesquisador ou tecnologista (orientador interno):

Elisa Maria Baggio Saitovitch

Coordenação: COMAN - Coordenação de Matéria Condensada, Física Aplicada e Nanociência

Nome do pesquisador ou tecnologista (coorientador/colaborador externo, se houver):

Magno de Assis Verly Heringer

Instituição de Pesquisa Externa (se houver): _____

Título do projeto: **Produção e caracterização de materiais magnéticos**

Palavra-chave: Magnetismo, Espectroscopia Mössbauer, Fase de Laves

Área de conhecimento: Física da Matéria Condensada Experimental

Pré-requisito desejado (se houver): Aluno deve ter cumprido o ciclo básico do curso de Física

Possibilidade de orientação remota: () Sim (x) Não

Resultante principal do Projeto:

- (x) Publicação (horizonte de 4 anos).
- (x) Preparação do bolsista para área científica.
- () Produto tecnológico.
- () Produto educacional ou didático.

Rio de Janeiro, 29 de março de 2023.

Projeto de Pesquisa

O projeto de pesquisa em questão tem como objetivo inserir o aluno na área científica, desenvolvendo pesquisa em física experimental da matéria condensada, visando a produção e caracterização de materiais magnéticos com propriedades interessantes e com potencial de aplicações.

Uma das linhas de pesquisas proposta envolve os compostos intermetálicos conhecidos como fases de Laves, que apresentam estequiometria do tipo AB_2 e que se cristalizam num dos três tipos de estruturas caracterizadas pelos compostos $MgCu_2$ (cúbica, C15), $MgZn_2$ (hexagonal, C14) e $MgNi_2$ (hexagonal, C36). Estas três estruturas têm propriedades comuns que se manifestam nas vizinhanças de cada átomo A e átomo B. Os átomos A têm 4 vizinhos A e 12 vizinhos B, e os átomos B possuem 6 vizinhos A e 6 vizinhos B. Além disso, essas estruturas envolvem um acoplamento especial entre as redes formadas pelos átomos A e B, onde as redes dos átomos A, são constituídas por camadas duplas tipo hexagonal, enquanto os átomos B se arranjam em forma de tetraedros.

Dentro desta família de materiais, daremos atenção especial aos compostos intermetálicos contendo terra rara e metal de transição 3d, onde A = terra rara e B = metal de transição 3d, com estrutura $MgCu_2$, os quais vem sendo intensamente estudados por apresentarem propriedades intrigantes como por exemplo, alto efeito magneto calórico (EMC)[1]. O EMC pode ser descrito como sendo a propriedade que alguns materiais magnéticos têm de se aquecer quando submetidos a um campo magnético externo e se resfriar quando este campo magnético é afastando. Estudos recentes têm mostrado que materiais com estas características se apresentam como uma boa alternativa para substituir a refrigeração convencional de compressão de gases, apresentando uma maior eficiência e sendo ecologicamente mais limpa.

O bolsista deverá trabalhar com diferentes compostos intermetálicos desta família no decorrer do projeto. No entanto, num primeiro momento o enfoque será o composto AB_2 , com A = Cério e B = Fe, formando o intermetálico $CeFe_2$. Este material é o único que exibe uma transição magnética abaixo da temperatura ambiente dentre as fases de laves, que comumente apresentam transições magnéticas da ordem de 600 K ou mais.

Além disso, o CeFe_2 [2] contém um arranjo magnético complexo em baixas temperaturas e entre 300 K e 400K parece não seguir a lei de Curie-Weiss, indicando que o sistema não está em seu estado paramagnético. O bolsista irá produzir e caracterizar estrutural e magneticamente, usando de forma extensiva a técnica de espectroscopia Mössbauer com sonda local ^{57}Fe numa faixa de temperatura entre 3 K e 1000 K, para elucidar o arranjo magnético local deste sistema em baixas temperaturas, além de junto com outras técnicas experimentais disponíveis no CBPF, estudar o comportamento deste material acima de 300K. O candidato irá trabalhar no Laboratório de Espectroscopia Mössbauer Jacques Danon, que conta com equipamentos de ponta em sua infraestrutura somando um total de mais de 1 milhão de reais adquiridos aos longos de mais de 40 anos, com projetos financiados por diferentes agências de fomento. Em resumo, a escolha deste projeto dará ao bolsista a oportunidade de trabalhar em uma instituição de ponta, com laboratórios capacitados e com pesquisadores experientes, consolidando o início de sua futura carreira científica.

Plano de Trabalho do Bolsista

Antes de mais nada, vale ressaltar que nenhuma das técnicas mencionadas a seguir é pré-requisito para o candidato. O bolsista terá sempre o acompanhamento de um pesquisador experiente que o ajudará em toda realização do projeto.

O primeiro passo será a síntese dos materiais, que deverá ser realizada utilizando um forno à arco presente no laboratório de preparação de amostra do CBPF. Como já mencionado anteriormente, o primeiro composto a ser tentado será o CeFe_2 , seguido por novos compostos desta família, de acordo com o tempo hábil. Após esta etapa de produção, será realizada uma análise de Difração de raios X (DRX) para determinarmos a fase cristalina formada. O laboratório de DRX do CBPF conta com difratômetros para medidas de amostras em pó, inclusive com um sistema de temperatura variável até 10 K. Confirmando a fase pretendida, o passo seguinte será a caracterização magnética, elétrica e termodinâmica.

Medidas de magnetização em função da temperatura, magnetização em função do campo magnético aplicado, resistividade elétrica e calor específico, poderão ser realizadas no Laboratório de Medidas Magnéticas e Transporte, implantado com projetos da FAPERJ, que contam com um sistema Cryofree Dynacool da Quantum Design (QD) com temperatura variável entre 2 K e 400 K e campo magnético aplicado de até 9 Tesla e um segundo sistema



Cryofree Versa Lab (QD) com temperatura variável entre 50 K e 400 K, com campo magnético aplicado de até 3 Tesla. Já as análises de espectroscopia Mössbauer (EM) que serão o foco principal do trabalho, serão realizadas no Laboratório Jacques Danon que tem em sua infraestrutura um criostato Cryofree da marca Montana Instruments, permitindo medidas de EM em temperaturas entre 3 K e 350 K, sem a necessidade do uso de Hélio líquido. Este laboratório conta também com outro criostato Oxford que permite medidas em temperaturas entre 4 K e 300 K com campo magnético aplicado de até 7 Tesla, além de um forno da Wissel permitindo medidas de EM acima da temperatura ambiente, podendo alcançar 1000 K. Neste laboratório existem e outras sondas locais além da ^{57}Fe , como a de ^{151}Eu e ^{119}Sn . De forma geral, estas técnicas citadas acima permitem determinar as possíveis transições magnéticas do material em questão, o tipo de transição (ferromagnética, antiferromagnética etc.), o tipo de material (condutor, isolante etc.) e observar possíveis propriedades termodinâmicas, como o efeito magneto calórico.

Além das técnicas de caracterização mencionadas acima o aluno se familiarizará com técnicas de vácuo e de sistemas criogênicos.

Referências:

- [1] M. K. Chattopadhyay, M. A. Manekar, and S. B. Roy, "Magnetocaloric effect in CeFe₂ and Ru-doped CeFe₂ alloys," *J Phys D Appl Phys*, vol. 39, no. 6, p. 1006, Mar. 2006, doi: 10.1088/0022-3727/39/6/002.
- [2] L. Paolasini *et al.*, "Magnetic ground state of pure and doped CeFe₂," *Phys Rev Lett*, vol. 90, no. 5, p. 4, 2003, doi: 10.1103/PHYSREVLETT.90.057201.