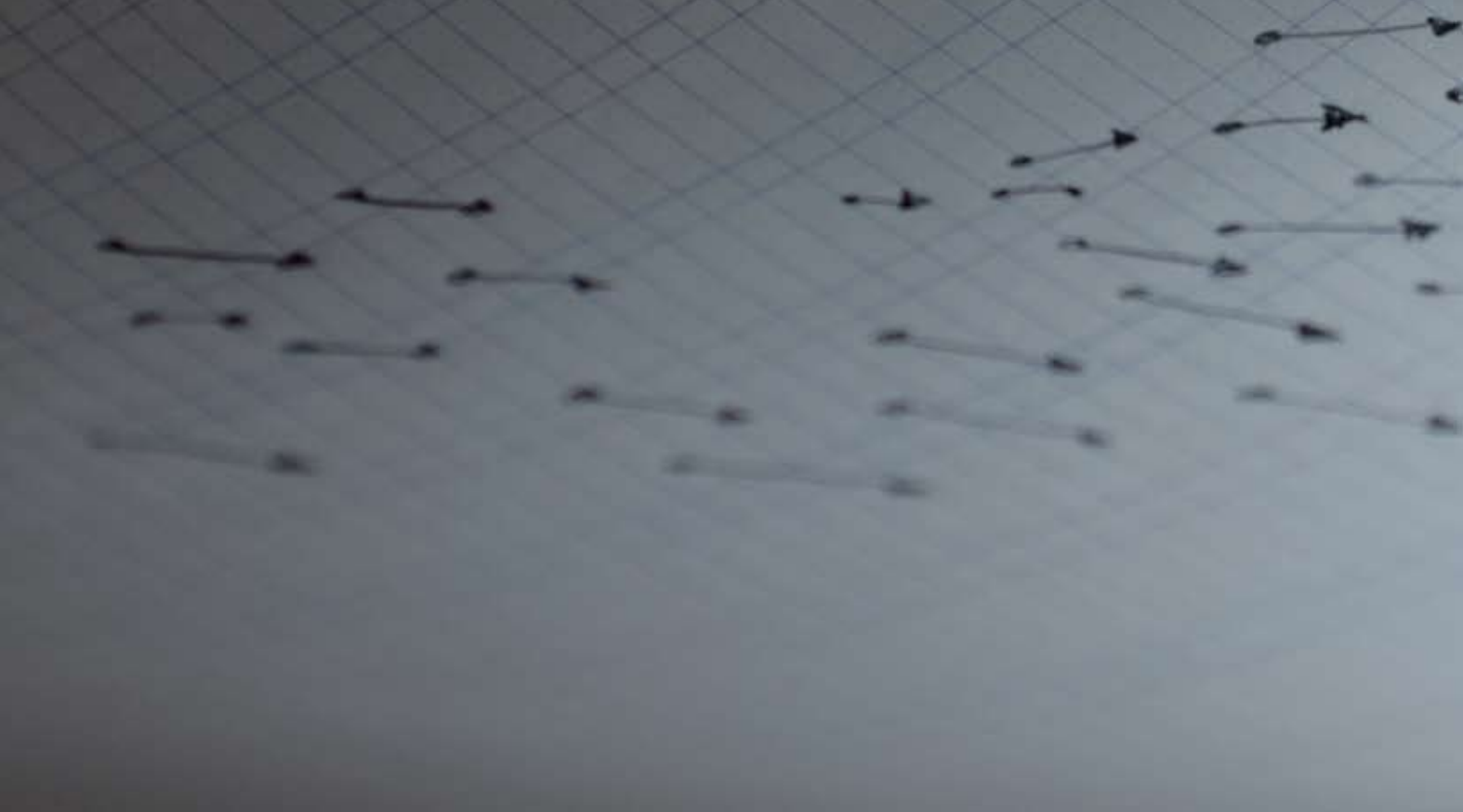


Magia superficial

Brasileiros começam a investigar novo material que promete revolucionar a eletrônica e a computação

TEXTO E ILUSTRAÇÃO **Igor Zolnerkevic**



De três anos para cá, uma coqueluche vem tomando conta da subárea da física que estuda os sólidos, a chamada física da matéria condensada. A febre do momento é uma nova classe de materiais com propriedades eletrônicas únicas, batizada com o nome intimidador de isolantes topológicos. “Eles são fantásticos”, afirma o físico Adalberto Fazzio, da Universidade de São Paulo (USP), coordenador da área de nanotecnologia do Ministério da Ciência e Tecnologia.

Fazzio testemunhou a explosão de interesse nos isolantes topológicos durante o encontro da Sociedade Americana de Física em março de 2010, quando pesquisadores do mundo inteiro se apinharam para assistir às palestras sobre as primeiras evidências conclusivas da produção relativamente barata desses materiais. Desde então, as pesquisas com isolantes topológicos só não se difundiram mais por conta da complexa teoria por trás deles e das sofisticadas técnicas necessárias para analisá-los em laboratório – desafios encarados recentemente por dois grupos brasileiros: um teórico, liderado por Fazzio, e outro experimental, coordenado pelo físico Vagner Eustáquio de Carvalho, da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG).

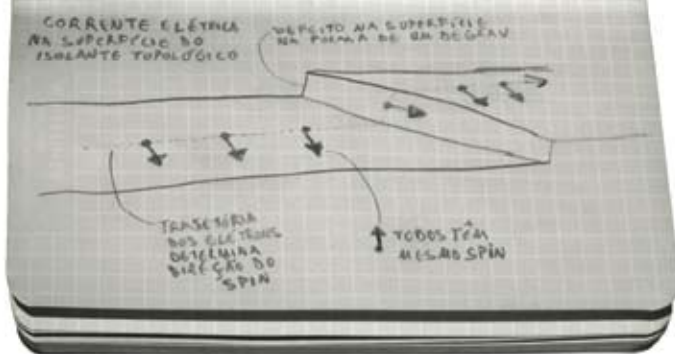
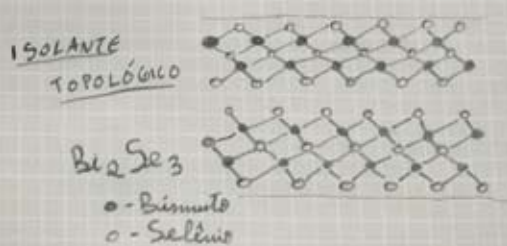
Segundo Carvalho, a esperança de que o novo xodó da matéria condensada seja mais que uma moda passageira continua alta. “As possibilidades de aplicações tecnológicas são reais”, diz. “Não tenho dúvida de que dentro de mais uns cinco anos teremos dispositivos eletrônicos produzidos a partir desses materiais.”

O segredo do sucesso dos isolantes topológicos está em sua superfície. Em trabalhos publicados entre 2005 e 2006, duas equipes norte-americanas de físicos teóricos, uma liderada por Charles Kane, da Universidade da Pensilvânia, e outra por Joel Moore, da Universidade da Califórnia, em Berkeley, previram que as partículas condutoras da eletricidade, os elétrons, se comportariam de modo muito estranho ao atravessarem um pedaço de cristal feito de certos metais pesados, como o bismuto. Os elétrons evitariam o interior do material, se propagando apenas na superfície do cristal. Até aí, nada de muito espetacular. O cristal funcionaria como o avesso de um fio elétrico: teria o miolo isolante envolvido por uma capa metálica condutora de eletricidade.

Representação
de elétrons com
spins alinhados

FÍSICA

Marcha de elétrons



O que deixou os físicos boquiabertos mesmo foi a maneira espontaneamente ordenada como os elétrons deveriam se movimentar na superfície. Os elétrons possuem uma propriedade magnética chamada de *spin*, que pode ser representada como uma pequena seta. Assim como os *spins* dos elétrons em um ímã apontam todos em uma mesma direção, conferindo a força magnética do material, os elétrons de uma corrente elétrica deslizando pela superfície de um isolante topológico têm seus *spins* alinhados, como uma fileira perfeita de soldados com suas baionetas apontando todas na mesma direção. Tal comportamento só havia sido observado antes em materiais sujeitos a campos magnéticos muito intensos e a temperaturas extremamente baixas, próximas do zero absoluto. Já os isolantes topológicos funcionariam por si sós, sem a necessidade de aplicar campos externos, e à temperatura ambiente.

Além disso, essa tendência ferrenha à ordem faz com que os elétrons passem rapidamente por pequenas rachaduras ou impurezas na superfície do cristal, sem se desviarem nem perderem energia como na maioria dos materiais. Essas correntes velozes e organizadas permitiriam aos engenheiros inaugurar a era da spintrônica, cuja ideia é usar o *spin* eletrônico não só para construir as minúsculas memórias magnéticas atuais, mas também novos transistores magnéticos, que processariam a informação de maneira mais rápida e energeticamente eficiente, na forma de zeros e uns codificados no *spin*. Há ainda trabalhos teóricos mostrando que seria possível em princípio usar o comportamento coletivo dos elétrons no isolante topológico para realizar um novo tipo de computação, a computação

Novo material funciona como um fio ao avesso: é isolante no interior e conduz eletricidade na superfície

quântica, exponencialmente mais rápida que a convencional.

A origem dos isolantes topológicos está na interação entre o *spin* e a órbita dos elétrons, fenômeno que ocorre em átomos com número atômico elevado e os físicos chamam de interação spin-órbita. Segundo a teoria, essa interação altera uma propriedade abstrata das funções matemáticas que descrevem o movimento dos elétrons. É a inversão dessa propriedade, chamada de paridade, que cria os estados especiais de condução elétrica na interface do material com o espaço vazio. Sem uma interação spin-órbita forte o suficiente, o material funcionaria como um isolante normal.

Para entender melhor a gênese e as propriedades dos estados de superfície, Fazzio e seus alunos de doutorado na USP Leonardo Abdalla e Leandro Rocha, junto com Tomé Schmidt e Roberto Miwa, ambos físicos da Universidade Federal de Uberlândia, em Minas Gerais, resolveram com o auxílio de computadores

as equações da mecânica quântica, incluindo a interação spin-órbita, descrevendo a estrutura átomo por átomo de um dos isolantes topológicos mais estudados em laboratório, o seleneto de bismuto (Bi_2Se_3).

O cristal é formado pelo empilhamento de blocos compactos de três camadas atômicas de selênio intercaladas com duas de bismuto. Entre esses blocos de cinco átomos de espessura há um espaçamento maior onde as ligações interatômicas são mais frágeis. Em uma das simulações computacionais, cujo resultado ainda não foi publicado, os pesquisadores forçaram a separação entre dois desses blocos. Assim, puderam observar, passo a passo, o nascimento dos estados de condução nas superfícies criadas pela abertura da fenda no cristal, verificando qual devia ser o tamanho mínimo da fenda para que eles surgissem – 7,2 angstroms, no caso.

Em um outro trabalho, a ser apresentado dia 28 deste mês em um encontro da Sociedade Americana de Física, em Boston, Fazzio, Schmidt e Miwa usaram as mesmas técnicas computacionais para investigar o que aconteceria com o seleneto de bismuto se fosse exposto ao ar e alguns átomos de oxigênio se alojassem no cristal. A simulação dos pesquisadores mostrou que, diferentemente de materiais

O PROJETO

Simulação e modelagem de nanoestruturas e materiais complexos – n° 2005/59581-6

MODALIDADE

Projeto Temático

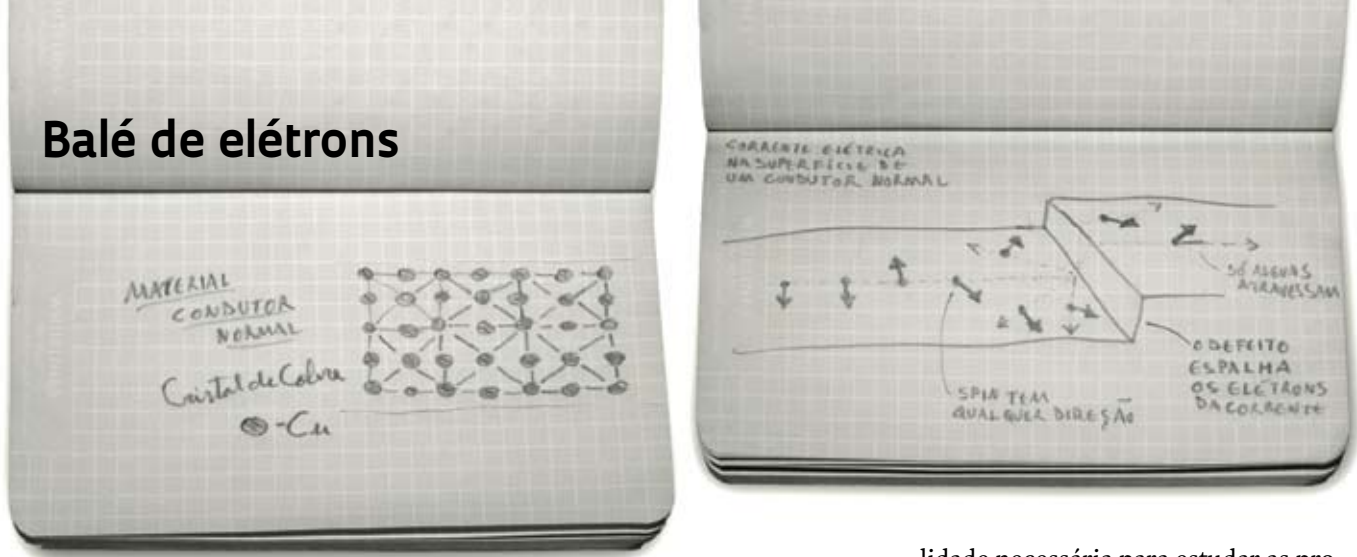
COORDENADOR

Adalberto Fazzio – IF/USP

INVESTIMENTO

R\$ 607.550,62 (FAPESP)

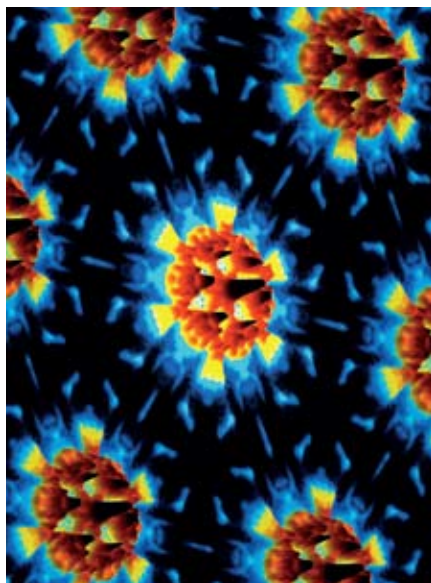
Balé de elétrons



como o silício, no qual a oxidação pode estragar completamente suas propriedades eletrônicas, o seleneto de bismuto permanece um isolante topológico na presença do oxigênio. A oxidação apenas aumenta levemente a energia dos estados condutores – um efeito que poderia ser explorado para controlar esses estados em futuras aplicações tecnológicas.

Já em um estudo publicado em dezembro de 2011 na revista *Physical Review B*, o trio de físicos teóricos simulou a inserção de átomos de cobalto no seleneto de bismuto. Ao contrário do oxigênio, as propriedades magnéticas do cobalto fazem com que esse átomo interfira na interação spin-órbita, destruindo a “proteção” dos estados condutores de superfície contra impurezas e defeitos no cristal. No entanto, os átomos de cobalto geram à sua volta um novo

Elétrons se propagam em superfície com defeitos de isolante topológico



padrão ordenado de *spins*. Enquanto no material puro os *spins* dos elétrons ficam alinhados paralelamente à superfície do material, a presença do cobalto introduz novos estados, alinhados perpendicularmente à superfície. Esses estados de *spin* perpendiculares poderiam ser usados para codificar memórias magnéticas em futuros dispositivos em escala atômica.

BUSCA PELO IDEAL

Para realizar todas essas aplicações tecnológicas, porém, ainda há vários obstáculos a serem vencidos. O principal é que, de fato, as amostras de seleneto de bismuto e de outro material promissor, o telureto de bismuto (Bi_2Te_3), analisadas até agora se comportaram como isolantes topológicos apenas aproximadamente. Inevitáveis impurezas fazem com que seu interior conduza um pouquinho de eletricidade. Essa corrente residual pode interferir na corrente de *spin* ordenado na superfície. “Conseguir estados de superfície completamente limpos é fundamental para uma aplicação tecnológica desses materiais”, explica Carvalho.

O grupo de pesquisadores da UFMG deu sorte. Quando o interesse pelos isolantes topológicos explodiu, Carvalho e seus colegas já tinham prontas amostras de Bi_2Te_3 e Bi_2Se_3 , que haviam produzido para um trabalho anterior, em que estudaram as propriedades termoelétricas desses materiais.

Um estudo feito em colaboração com o grupo do físico Philip Hofmann, da Universidade de Aarhus, Dinamarca, e apresentado em agosto de 2011 na Décima Conferência Internacional de Estruturas de Superfície, em Hong Kong, mostrou que as amostras tinham a qua-

lidade necessária para estudar as propriedades de isolantes topológicos.

Nesse meio-tempo, a equipe de Carvalho foi a primeira a desenvolver em um laboratório brasileiro a técnica conhecida como Arpes, sigla em inglês para espectroscopia de fotoelétrons com resolução angular. Nesse procedimento experimental, as partículas de luz emitidas por uma lâmpada especial colidem com uma amostra mantida em um ambiente de ultra alto vácuo e e arrancam seus elétrons. Um espectroscópio de alta resolução mede então as propriedades desses elétrons, permitindo deduzir qual era seu estado no material. Foi por meio da Arpes que se confirmou a existência dos isolantes topológicos.

Os pesquisadores mineiros dominam outra técnica, a difração de elétrons de baixa energia (Leed, na sigla em inglês), por meio da qual conseguem determinar a estrutura atômica na superfície das amostras. A ideia deles agora é usar a Leed em conjunto com a Arpes para investigar qual a influência da posição dos átomos nos estados eletrônicos do material.

Outro experimento promissor que o grupo vem conduzindo é a deposição de camadas de um átomo de espessura, de antimônio, cobre, estanho ou manganês, sobre os cristais de Bi_2Te_3 e Bi_2Se_3 . Pesquisas recentes mostraram que a presença desses filmes metálicos ultrafinos diminui a densidade de elétrons sendo conduzidos no meio do material. “A esperança”, explica Carvalho, “é que, à medida que controlarmos a presença desses filmes, a gente consiga fazer um isolante topológico verdadeiro.” ■

Artigo científico

SCHMIDT, T.M.; et al. Spin texture and magnetic anisotropy of Co impurities in Bi_2Se_3 topological insulators. *Physical Review B*. v. 84. 13 de dez. 2011.