



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
Instituto de Física Gleb Wataghin

**Raphael Bonfim de Amorim François**

**Investigação das propriedades eletrônicas e estruturais de  
materiais topológicos sob aplicação de pressão uniaxial**

**Investigation of electronic and structural properties of  
topological materials under uniaxial strain**

Campinas  
2024

**Raphael Bonfim de Amorim François**

**Investigação das propriedades eletrônicas e estruturais de materiais topológicos sob aplicação de pressão uniaxial**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Física, na área de Física Aplicada.

**Orientadora: Profa. Dra. Cris Adriano**  
**Coorientadora: Dra. Danusa do Carmo**

Este trabalho corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado defendida pelo aluno Raphael Bonfim de Amorim François, orientada pela Profa. Dra. Cris Adriano.

Campinas  
2024

Ficha catalográfica  
Universidade Estadual de Campinas  
Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin  
Lucimeire de Oliveira Silva da Rocha - CRB 8/9174

F848i François, Raphael Bonfim de Amorim, 1996-  
Investigação das propriedades eletrônicas e estruturais de materiais topológicos sob aplicação de pressão uniaxial / Raphael Bonfim de Amorim François. – Campinas, SP : [s.n.], 2024.

Orientador: Cris Adriano.  
Coorientador: Danusa do Carmo.  
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin.

1. Estados topológicos da matéria. 2. Pressão uniaxial. 3. Antiferromagnetismo. 4. Efeito anômalo de Hall. 5. Raios X - Difração. I. Adriano, Cris, 1980-. II. Carmo, Danusa do. III. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física Gleb Wataghin. IV. Título.

Informações Complementares

**Título em outro idioma:** Investigation of electronic and structural properties of topological materials under uniaxial strain

**Palavras-chave em inglês:**

Topological states of matter

Uniaxial pressure

Antiferromagnetism

Anomalous Hall effect

X-rays - Diffraction

**Área de concentração:** Física Aplicada

**Titulação:** Mestre em Física

**Banca examinadora:**

Danusa do Carmo [Coorientador]

Fanny Béron

Marcos de Abreu Ávila

**Data de defesa:** 22-01-2024

**Programa de Pós-Graduação:** Física

**Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)**

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0002-9304-1279>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/4480365055677738>



INSTITUTO DE FÍSICA  
GLEB WATAGHIN

MEMBROS DA COMISSÃO EXAMINADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DO ALUNO RAPHAEL BONFIM DE AMORIM FRANÇOIS - RA 176390, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 22/01/2024.

COMISSÃO JULGADORA:

- Dra. Danusa do Carmo – Presidente e Coorientadora (Laboratório Nacional Luz Síncroton - LNLS)
- Profa. Dra. Fanny Béron (IFGW/ UNICAMP)
- Prof. Dr. Marcos de Abreu Avila (Universidade Federal do ABC, Centro de Ciências Naturais e Humanas)

**OBS.:** Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

CAMPINAS

2024

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente à minha família, em especial meus pais, Elias e Ivana, que sempre me apoiaram e se esforçaram para me dar a oportunidade de chegar aqui. A todos os familiares que também me incentivaram e elogiaram a coragem de enfrentar esse desafio. À minha esposa Guerline, que esteve comigo a todo instante, sendo amiga, companheira e sempre me motivando a continuar.

Também sou muito grato à minha orientadora Profa. Dra. Cris Adriano, que sempre me incentivou e buscou as melhores oportunidades para mim. Sem ela eu não estaria aqui. À minha coorientadora Dra. Danusa do Carmo, por ser dedicada e atenciosa, me ajudando em cada etapa e me possibilitando esta conquista.

Aos meus colegas de laboratório da Unicamp, do Sirius e do Max Planck, os quais são responsáveis por boa parte do meu aprendizado. Por me ensinar os procedimentos e as técnicas experimentais que utilizei na minha pesquisa, pelas discussões e pela amizade.

Também agradeço Dr. Pascoal Pagliuso pelas discussões gerais, Dr. Ricardo Reis pelas discussões e oportunidade de estágio em Dresden, Dr. Michael Nicklas por me receber no Max Planck, Dr. Anderson Okazaki pela ajuda e discussões nos experimentos de transporte elétrico, e Dr. Guilherme Calligaris pela ajuda e discussões nos experimentos de difração de raios X.

Ao Sirius e ao Max Planck pelo apoio financeiro durante o estágio em Dresden.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. O presente trabalho também foi realizado com apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq e Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovações.

# Resumo

Semimetais de Weyl antiferromagnéticos têm atraído a atenção dos pesquisadores por causa das possibilidades de aplicações em novas tecnologias. Entretanto, ainda há certa dificuldade no entendimento da topologia desses materiais porque nem sempre é possível observar diretamente suas estruturas de bandas. Dessa forma, uma técnica que tem se mostrado útil nesses estudos é a aplicação de pressão uniaxial, onde a deformação provocada por ela modifica a topologia do material, fazendo com que as suas propriedades também mudem. Isso não só traz uma nova forma de investigar as propriedades desses materiais, como também possibilita uma forma de controle. Nesta dissertação foram estudadas as propriedades eletrônicas e estruturais de dois semimetais de Weyl sob pressão uniaxial, o  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  e o  $\text{GdPtBi}$ .

$\text{Mn}_3\text{Sn}$  é um composto do tipo Heusler, hexagonal, com estrutura antiferromagnética triangular não-colinear em temperatura ambiente que gera uma curvatura de Berry remanescente e, com isso, surgem propriedades exóticas, como o efeito Hall anômalo (AHE). Nele foi investigado o comportamento do AHE com pressão uniaxial nas direções do eixo  $c$  e ao longo do plano  $ab$ . Pressão uniaxial no eixo  $c$  não gerou mudanças significativas, entretanto, pressão ao longo do plano  $ab$  gerou mudanças no AHE, reduzindo sua amplitude e invertendo de sinal durante a compressão. Juntamente com o comportamento estrutural, observado através de difração de raios X, onde não houve transição estrutural, esses resultados indicaram que o AHE se origina unicamente da estrutura triangular do plano  $ab$ .

$\text{GdPtBi}$  é um composto do tipo *half*-Heusler, cúbico, que tem ordenamento antiferromagnético abaixo de 9 K e apresenta propriedades topológicas em baixas temperaturas, como AHE e magnetorresistência (MR) negativa. Sua investigação sob pressão uniaxial mostrou variações no AHE e na curva de MR negativa, indicando que a compressão diminui esses efeitos, enquanto a tensão os aumenta. Analisando mais a fundo essa curva, notou-se que a queda inicial da MR em baixos campos magnéticos, que pode se tratar de um efeito de localização fraca, diminuiu com a compressão. Olhando para altos campos, as oscilações quânticas mostraram movimento nas bandas eletrônicas. Mudanças na resistividade abaixo da  $T_N$  também indicaram movimento nas bandas, apesar de que a transição em si permaneceu inalterada.

De maneira geral, a pressão uniaxial se mostrou eficiente para induzir mudanças na superfície de Fermi dos materiais e, com isso, mudar as propriedades topológicas, tanto para entendê-las melhor, como para obter alguma forma de controle sobre elas.

# Abstract

Antiferromagnetic Weyl semimetals have attracted attention from researchers due to their potential applications in emerging technologies. However, understanding the topology of these materials is challenging as their band structures are not always directly observable. Consequently, a technique that has proven useful in such studies is the application of uniaxial strain, where the resulting deformation alters the material's topology, leading to changes in its properties. This not only provides a novel avenue for investigating the properties of these materials but also offers a means of control. In this dissertation, the electronic and structural properties of two Weyl semimetals under uniaxial strain, namely  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  and  $\text{GdPtBi}$ , were investigated.

$\text{Mn}_3\text{Sn}$  is a hexagonal Heusler compound with a non-collinear triangular antiferromagnetic structure at room temperature, giving rise to a non-vanishing Berry curvature and resulting in exotic properties such as the anomalous Hall effect (AHE). The behavior of AHE under uniaxial strain along the  $c$ -axis and within the  $ab$ -plane was studied. While no significant changes were observed with strain along the  $c$ -axis, substantial variations were noted with strain in the  $ab$ -plane, including a decrease in the amplitude and sign inversion of the AHE during compression. Alongside structural observations using X-ray diffraction, which revealed no structural transition, these results indicated that AHE solely originates from the  $ab$ -plane structure.

$\text{GdPtBi}$  is a cubic half-Heusler compound with antiferromagnetic ordering below 9 K, displaying topological properties at low temperatures, such as AHE and negative magnetoresistance (MR). Uniaxial strain investigation showed variation in AHE and in the negative MR curve, suggesting that compression diminishes these effects, while tension enhances them. Further analysis of the MR curve revealed that the initial drop in MR at low magnetic fields, possibly indicative of weak localization effect, diminished under compression. Examining high fields, quantum oscillations demonstrated movement in the electronic bands. Changes in resistivity below  $T_N$  also indicated band movement, although the transition itself remained unaffected.

Overall, uniaxial strain proved to be a compelling tool for inducing changes in the Fermi surface of materials, thereby altering their topological properties. This not only enhances our understanding of these properties but also provides a means of control.

# Lista de Figuras

2.1	Ferromagnetismo e antiferromagnetismo. . . . .	17
2.2	Relação entre diferentes formas geométricas com respeito às suas topologias. . . . .	19
2.3	Inversão de bandas em um isolante topológico. . . . .	19
2.4	Estrutura de bandas e superfície de Fermi de um metal normal, um semimetal de Dirac e um semimetal de Weyl. . . . .	20
2.5	Ilustração de ganho de fase geométrica de um vetor através de um trajeto ao longo de uma superfície esférica. . . . .	21
2.6	Efeito Hall. . . . .	22
2.7	Oscilações quânticas em condutores. . . . .	24
2.8	Anomalia quiral. . . . .	25
2.9	Esquema da difração de raios X. . . . .	27
3.1	Síntese de monocristais por fluxo metálico. . . . .	29
3.2	Difratometria de pó de raios X. . . . .	30
3.3	Equipamento usado para medidas de magnetização. . . . .	31
3.4	Equipamento usado para medidas de transporte elétrico. . . . .	32
3.5	Esquema com 6 contatos elétricos para medidas de resistividade. . . . .	34
3.6	Células de pressão uniaxial. . . . .	34
3.7	Esquema da célula de pressão uniaxial. . . . .	35
3.8	Formato de amostra recomendado para montagem da célula de pressão uniaxial. . . . .	36
3.9	Passo a passo da montagem da célula de pressão uniaxial. . . . .	37
3.10	Experimento de difração de Laue por reflexão. . . . .	39
3.11	Montagem do experimento de difração de raios X em monocristais com pressão uniaxial na linha de luz EMA do Sirius. . . . .	40
3.12	Esquema da difração de raios X do experimento na linha EMA do Sirius. . . . .	40
3.13	Imagem gerada pelo detector Pilatus 300K com regiões de interesse ROI1 e ROI2 indicadas. . . . .	41
3.14	Acessórios utilizados para medir resistividade com pressão uniaxial no PPMS. . . . .	42
3.15	Montagem para experimento de transporte elétrico no PPMS DynaCool do LN-Nano, CNPEM. . . . .	43
4.1	Estrutura do $Mn_3Sn$ . . . . .	44
4.2	Tratamento térmico para obtenção de $Mn_3Sn$ . . . . .	46
4.3	Identificação das fases cristalinas após crescimento de $Mn_3Sn$ . . . . .	46
4.4	Susceptibilidade magnética de $Mn_3Sn$ . . . . .	47
4.5	Transporte elétrico em $Mn_3Sn$ . . . . .	48
4.6	Resistividade Hall sob pressão uniaxial ao longo do eixo c. . . . .	48
4.7	Resistividade Hall sob pressão uniaxial ao longo do plano ab. . . . .	49
4.8	Esquema experimento de DRX em monocristais de $Mn_3Sn$ . . . . .	51

4.9	Difração de raios X de $Mn_3Sn$ em função dos ângulos de difração para diferentes tensões uniaxiais. . . . .	52
4.10	Largura a meia altura (FWHM) dos picos observados na direção (0 0 10) em função da deformação. . . . .	53
4.11	Parâmetros de rede do $Mn_3Sn$ para diferentes tensões uniaxiais calculados a partir da difração de raios X, considerando que a estrutura permanece hexagonal. . . . .	53
5.1	Estruturas cristalina e magnética do GdPtBi. . . . .	54
5.2	Estruturas de bandas do GdPtBi. . . . .	55
5.3	Síntese de GdPtBi. . . . .	56
5.4	Caracterizações macroscópicas de GdPtBi. . . . .	57
5.5	Transporte elétrico em GdPtBi. . . . .	58
5.6	Resistividade em função da temperatura para algumas deformações de GdPtBi. . . . .	59
5.7	Efeito Hall com pressão uniaxial em GdPtBi. . . . .	60
5.8	Curva de magnetorresistência para diferentes pressões uniaxiais em 2K. . . . .	61
5.9	Curva de magnetorresistência para diferentes pressões uniaxiais em outras temperaturas. . . . .	63
5.10	Curva de magnetorresistência para diferentes pressões uniaxiais em 2K na amostra orientada. . . . .	64
5.11	Oscilações quânticas em GdPtBi. . . . .	65
5.12	Oscilações quânticas em GdPtBi com pressão uniaxial. . . . .	66
5.13	Frequência e interceptação das oscilações quânticas com pressão uniaxial em GdPtBi orientado no eixo (1 0 0). . . . .	67
5.14	Montagem e orientação do GdPtBi para o experimento de DRX. . . . .	68
5.15	Difração de raios X de $Mn_3Sn$ em função dos ângulos de difração para diferentes tensões uniaxiais. . . . .	69
5.16	Parâmetros de rede aproximados do GdPtBi para diferentes tensões uniaxiais calculados a partir da difração de raios X. As setas sugerem uma tendência dos pontos. . . . .	70
5.17	Variação nas distâncias interplanares dos planos medidos com DRX em função da deformação na célula de pressão uniaxial. As setas sugerem uma tendência dos pontos. . . . .	71

# Lista de Abreviaturas e Siglas

AC	<i>Alternating current</i> ou corrente alternada
AHE	<i>Anomalous Hall effect</i> ou efeito Hall anômalo
CNPEM	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais
DRX	Difração de raios X
DSM	Dirac <i>semimetals</i> ou semimetais de Dirac
EMA	<i>Extreme condition Methods of Analysis</i>
FS	<i>Fermi surface</i> ou superfície de Fermi
FWHM	<i>Full width at half maximum</i> ou largura a meia altura
GPOMS	Grupo de Propriedades Ópticas e Magnéticas dos Sólidos
IFGW	Instituto de Física Gleb Wataghin
LCTE	Laboratório de Condições Termodinâmicas Extremas
LNNano	Laboratório Nacional de Nanotecnologia
MPI CPfS	<i>Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe</i>
MPMS3	<i>Magnetic Property Measurement System</i>
MR	Magnetorresistência
PPMS	<i>Physical Property Material System</i>
QO	<i>Quantum oscillations</i> ou oscilações quânticas
ROI	<i>Region of interest</i> ou região de interesse
SQUID	<i>Superconducting quantum interference device</i>
TI	<i>Topological insulator</i> ou isolante topológico
Unicamp	Universidade Estadual de Campinas
VSM	<i>Vibrating sample magnetometer</i>
WAL	<i>Weak antilocalization</i> ou antilocalização fraca
WL	<i>Weak localization</i> ou localização fraca
WSM	Weyl <i>semimetals</i> ou semimetais de Weyl

# Lista de Símbolos

$\epsilon_0$	Permissividade elétrica do vácuo
$\epsilon$	Deformação uniaxial
$\theta$	Ângulo de incidência do feixe de raios X na geometria Bragg-Brentano
$\mu_0$	Permeabilidade magnética do vácuo
$\rho_{xx}$	Resistividade longitudinal
$\rho_{xy}$	Resistividade Hall
$\sigma_{xx}$	Condutividade longitudinal
$\sigma_{xy}$	Condutividade Hall
$\Phi_B$	Fase de Berry
$\chi$	Susceptibilidade magnética
B	Campo magnético
Bi	Elemento químico Bismuto
C	Capacitância
e	Carga do elétron
$E_F$	Energia de Fermi
Gd	Elemento químico Gadolínio
Ge	Elemento químico Germânio
$\hbar$	Constante de Planck reduzida
I	Corrente elétrica
Mn	Elemento químico Manganês
M	Magnetização
Pt	Elemento químico Platina
Sn	Elemento químico Estanho
T	Temperatura
$T_N$	Temperatura de Néel
V	Tensão elétrica

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>Fundamentação teórica</b>	<b>16</b>
2.1	Magnetismo . . . . .	16
2.2	Topologia não-trivial . . . . .	18
2.2.1	Semimetais de Weyl . . . . .	20
2.2.2	Fase de Berry . . . . .	21
2.3	Propriedades macroscópicas em materiais topológicos . . . . .	22
2.3.1	Efeito Hall anômalo . . . . .	22
2.3.2	Oscilações quânticas . . . . .	23
2.3.3	Magnetorresistência negativa . . . . .	25
2.4	Difração de raios X . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Técnicas Experimentais</b>	<b>28</b>
3.1	Síntese de monocristais por fluxo metálico . . . . .	28
3.2	Difração de pó de raios X . . . . .	30
3.3	Magnetização . . . . .	31
3.4	Transporte elétrico . . . . .	32
3.5	Pressão uniaxial . . . . .	33
3.5.1	Células de pressão uniaxial . . . . .	35
3.5.2	Montagem da amostra na célula de pressão uniaxial . . . . .	37
3.5.3	Orientação dos cristais . . . . .	38
3.5.4	Medidas de difração de raios X em monocristais com pressão uniaxial . . . . .	39
3.5.5	Medidas de transporte elétrico com pressão uniaxial . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Mn<sub>3</sub>Sn</b>	<b>44</b>
4.1	Síntese e caracterização de Mn <sub>3</sub> Sn . . . . .	45
4.2	Pressão uniaxial . . . . .	48
4.2.1	Efeito Hall em Mn <sub>3</sub> Sn . . . . .	48
4.2.2	Difração de raios X em monocristal de Mn <sub>3</sub> Sn . . . . .	50
<b>5</b>	<b>GdPtBi</b>	<b>54</b>
5.1	Síntese e caracterização de GdPtBi . . . . .	56
5.2	Pressão uniaxial . . . . .	59
5.2.1	Temperatura de Néel e Efeito Hall em GdPtBi . . . . .	59
5.2.2	Magnetorresistência em GdPtBi . . . . .	61
5.2.3	Oscilações quânticas em GdPtBi . . . . .	65
5.2.4	Difração de raios X em monocristal de GdPtBi . . . . .	68

<b>6 Conclusões e perspectivas</b>	<b>72</b>
<b>Referências bibliográficas</b>	<b>74</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Com o avanço da eletrônica, a velocidade de processamento e transmissão de dados tem ficado cada vez maior. Em contrapartida, o avanço da tecnologia da informação é tão rápido que exige dispositivos ainda mais velozes, gerando, assim, uma grande busca por novas tecnologias. Em especial, a busca por materiais que exibem novos fenômenos de transporte tem crescido devido às possibilidades de aplicação na spintrônica. Materiais topológicos, indo desde isolantes topológicos até semimetais de Dirac e de Weyl, são materiais que têm se destacado nessa busca. Particularmente, os semimetais de Weyl são conhecidos por terem bandas de energia com dispersão linear nos pontos de Weyl, o que faz com que apareçam propriedades interessantes como anomalia quiral e arcos de Fermi, por exemplo [67].

$Mn_3Sn$  é um antiferromagneto não-colinear que se enquadra nessa classe de materiais. O antiferromagnetismo, nesse caso, é interessante por possuir um movimento de spin com frequências muito maiores que ferromagnetos, chegando a frequências de terahertz [37], ao mesmo tempo que não gera campos magnéticos perturbatórios [17]. Já o fato de ser não-colinear faz com que apareçam propriedades devido a uma fase de Berry remanescente, como o efeito Hall anômalo gigante, efeito Nernst anômalo, efeito Hall topológico, efeito Hall planar, entre outros [57]. Para completar, a maioria dessas propriedades acontecem em temperatura ambiente, o que facilita aplicações futuras.

Também em um enquadramento parecido,  $GdPtBi$  é um semimetal de Weyl antiferromagnético pertencente à família  $RPtBi$  (R sendo um lantanídeo), a qual possui diversos estudos apontando diferentes fases topológicas. A fase topológica nesse composto aparece com a aplicação de um campo magnético, sendo evidenciada pelas propriedades de efeito Hall planar, efeito Hall anômalo, magnetorresistência negativa, entre outras [67].

Junto da procura por materiais que apresentem propriedades com potencial de aplicação, é importante também encontrar uma forma de controlar essas propriedades. A pressão uniaxial pode ser uma ferramenta útil nesse caso. Como as propriedades desses materiais estão ligadas à estrutura eletrônica, provocar deformações pode causar mudanças nelas e possivelmente controlá-las. Além disso, modificar o material pode trazer um entendimento melhor dos fenômenos envolvidos.

Neste trabalho, com o objetivo de utilizar a pressão uniaxial para modificar as propriedades de materiais topológicos, avaliando se esta é uma técnica capaz de controlá-las, foi feito um estudo com pressão uniaxial nos compostos  $Mn_3Sn$  e  $GdPtBi$ . O efeito da pressão uniaxial nas propriedades de transporte elétrico, como efeito Hall anômalo e magnetorresistência negativa, foi investigado, juntamente com o comportamento da estrutura cristalina desses compostos através de difração de raios X. Os resultados obtidos estão apresentados nesta dissertação, organizada da seguinte forma. No Capítulo 2 é apresentada uma breve revisão teórica para o entendimento dos materiais e as propriedades que foram estudadas. A seguir, o Capítulo 3 expõe as técnicas experimentais utilizadas. Nos capítulos 4 e 5 estão os resultados e discussão e, no Capítulo 6, são feitas as considerações finais.

# Capítulo 2

## Fundamentação teórica

Tendo em vista que os materiais aqui estudados,  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  e  $\text{GdPtBi}$ , são materiais antiferromagnéticos topológicos, este capítulo trará uma revisão sobre os temas fundamentais envolvidos. Após uma introdução básica sobre magnetismo, são abordados conceitos de topologia, dando ênfase aos semimetais de Weyl. Em seguida, também é revisada a teoria por detrás das principais propriedades estudadas, sendo elas o efeito Hall anômalo, as oscilações quânticas e a magnetorresistência negativa. Por fim, é abordada difração de raios X.

### 2.1 Magnetismo

O magnetismo se origina em propriedades fundamentais da matéria, estando diretamente relacionado com o momento magnético do átomo. Para um átomo livre, as três principais fontes do seu momento magnético são o *spin* dos elétrons, o momento angular orbital e a mudança do momento angular orbital induzido por um campo magnético aplicado. Os dois primeiros geram contribuições paramagnéticas, enquanto o terceiro gera contribuição diamagnética [20].

Em um sólido magnético há um grande número de átomos com momentos magnéticos. Assim, é definida a magnetização  $M$  como o momento magnético por unidade de volume. Pode-se, então, definir susceptibilidade magnética como:

$$\chi = \frac{\mu_0 M}{B}, \quad (2.1)$$

onde  $\mu_0$  é a permeabilidade magnética do vácuo e  $B$  é a intensidade do campo magnético externo aplicado.

No eletromagnetismo, a Lei de Lenz indica que, quando o fluxo magnético que atravessa um circuito fechado muda, uma corrente induzida é gerada de um jeito a se opor à mudança do fluxo. O diamagnetismo é associado a um comportamento parecido, onde há uma tendência das cargas elétricas bloquearem parcialmente o campo magnético aplicado no interior do material [20]. Todo material possui algum nível de diamagnetismo, contribuindo com uma susceptibilidade negativa, mas, em geral, esse valor é pequeno quando comparado a outras contribuições [5].

Já o paramagnetismo corresponde a uma susceptibilidade positiva, de forma que um campo magnético aplicado induz uma magnetização que se alinha com campo magnético que o causou. Nesse caso, há átomos com momentos magnéticos não nulos devido a elétrons desemparelhados, mas, como a interação dos momentos magnéticos dos átomos vizinhos é muito fraca, eles apontam para direções aleatórias quando não há campo magnético aplicado. Entretanto, na presença deste, os momentos adquirem um grau de alinhamento que depende da intensidade do campo magnético [5].

Existem também os casos em que os átomos possuem momentos magnéticos e as interações entre si não são tão fracas. Geralmente, com a diminuição da temperatura, a agitação térmica diminui e as interações passam a ter maior relevância, gerando um ordenamento magnético. Um ordenamento bastante comum é quando os momentos magnéticos tendem a se alinhar paralelamente, conhecido como ferromagnetismo. Esse ordenamento faz com que haja um momento magnético total no material que aparece mesmo sem aplicação de campo magnético.

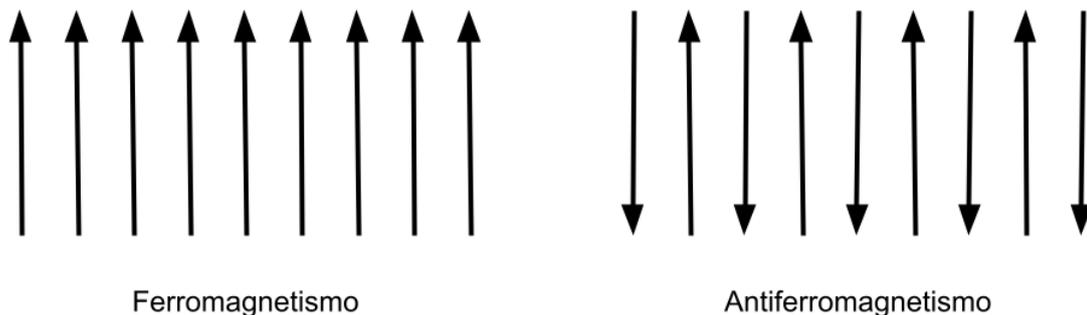


Figura 2.1: Ferromagnetismo e antiferromagnetismo representados por alinhamentos de momentos magnéticos paralelos e antiparalelos, respectivamente.

Outro ordenamento bastante comum é o antiferromagnetismo. Nesse caso, os momentos magnéticos vão se ordenar de forma que a soma total tende a ser zero. O exemplo mais simples é quando há um alinhamento antiparalelo, onde para cada momento apontando numa direção,

haverá outro apontando numa direção oposta. Neste trabalho foram estudados dois materiais com fase antiferromagnética: o GdPtBi, que possui planos ferromagnéticos ordenados antiferromagneticamente; e o Mn<sub>3</sub>Sn, com um antiferromagnetismo triangular não-colinear.

## 2.2 Topologia não-trivial

Materiais com topologia não-trivial, também chamados de materiais topológicos, são um grupo de materiais quânticos que têm atraído a atenção de pesquisadores devido às diferentes propriedades que apresentam. Esses materiais são caracterizados pelos estados de superfície que aparecem devido à topologia da estrutura de bandas do *bulk* [61] e suas propriedades só puderam ser explicadas após o surgimento dos conceitos de topologia. Os principais exemplos são os isolantes topológicos (TI), os semimetais de Dirac (DSM) e os semimetais de Weyl (WSM).

Para entender esses materiais, o conceito de topologia surgiu em analogia à matemática, onde ele é usado para classificar formas geométricas. Quando duas formas podem ser transformadas uma na outra através de deformações suaves e contínuas, elas são consideradas topologicamente equivalentes. Por exemplo, um cilindro pode ser transformado em um paralelepípedo através de mudanças contínuas, mas não pode ser transformada em um anel, porque precisaria ser feito um furo (mudança descontínua), Figura 2.2. Nesse caso o cilindro e o paralelepípedo têm a mesma topologia, enquanto o anel tem uma topologia diferente. Na física, quando um conjunto de funções de onda da mecânica quântica está adiabaticamente conectado com um diferente conjunto, eles podem ser considerados topologicamente equivalentes. Na prática, combinações simples de funções de onda atômicas são chamadas triviais e qualquer sistema adiabaticamente conectado ao limite atômico é topologicamente trivial. A não-trivialidade aparece quando há função de onda adiabaticamente distinta desse limite [48].

Em geral, a estrutura de bandas topológica aparece na forma de inversão de bandas, onde há uma inversão de níveis de energia dos elétrons, ou seja, elétrons de uma banda passam a ocupar níveis de energia de outra banda, enquanto os elétrons desta última passam a ocupar os estados da primeira [3]. Isso pode acontecer por causa de um acoplamento *spin*-órbita, que é a interação entre o *spin* do elétron e seu movimento orbital em torno do núcleo [35]. Por exemplo, em um isolante topológico, devido a um forte acoplamento *spin*-órbita, as bandas de condução e de valência são invertidas e separadas por um *gap* [62], como ilustrado na Figura

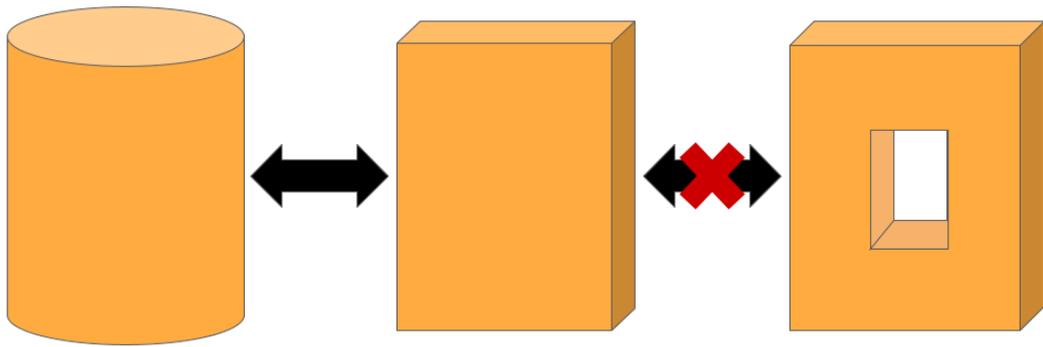


Figura 2.2: Relação entre diferentes formas geométricas com respeito às suas topologias. O cilindro pode se transformar em um paralelepípedo por meio de mudanças contínuas, e vice-versa, indicando que possuem mesma topologia. Por outro lado, para se transformarem em um paralelepípedo com um buraco é necessário uma ação descontínua, ou seja, fazer um furo, resultando em uma topologia diferente.

2.3. Nesse caso, não é possível sair desse estado para um isolante trivial com mudanças suaves e contínuas, é necessário antes fechar o *gap* (análogo ao furo na bola). Esse fechamento de *gap* se realiza em toda a superfície do TI, geralmente através de cones de Dirac, constituídos por bandas que se tocam em um único ponto com dispersão linear, para separar o estado trivial externo do estado topológico no *bulk* [28]. Como resultado, o TI é isolante no *bulk* e condutor na superfície.

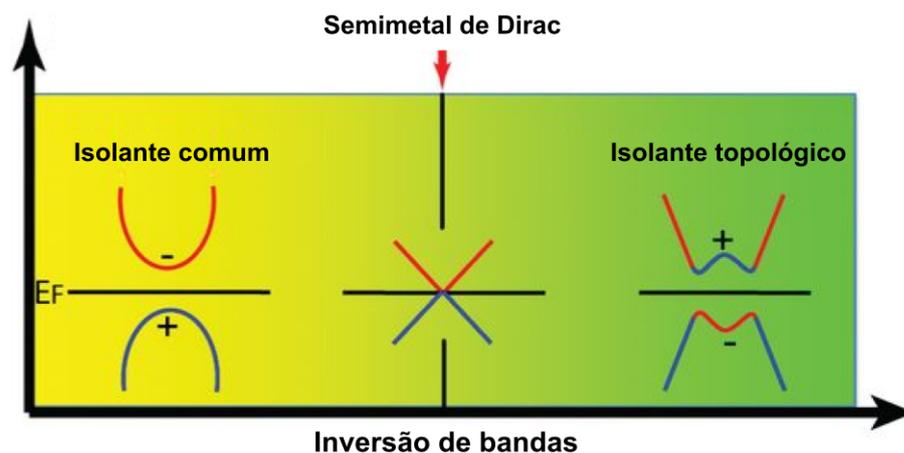


Figura 2.3: À esquerda, bandas parabólicas separadas por um *gap*, indicando um isolante comum. No centro, bandas se tocando com dispersão linear, caracterizando um cone de Dirac. À direita, bandas invertidas e separadas por um *gap* no *bulk* de um isolante topológico. Adaptado de [28].

### 2.2.1 Semimetais de Weyl

Semimetais topológicos são caracterizados por terem inversão das bandas de condução e de valência, como nos TIs, mas com o *gap* fechando apenas em alguns pontos ou linhas [58]. Esses pontos se conectam através de cones de Dirac ou de Weyl, que, diferente da típica dispersão parabólica de bandas, possuem dispersão linear seguindo as equações de Dirac e de Weyl [56]. Nos cones de Dirac, tanto a simetria de reversão temporal quanto a simetria de inversão são preservadas, obtendo-se, assim, cones duplamente degenerados. Quando há quebra de alguma dessas simetrias, a degenerescência vai se desfazer e os cones vão separar, formando dois cones de Weyl com quiralidades opostas. Cones de Weyl podem, então, ser considerados como resultado da quebra de simetria de um cone de Dirac. Isso significa que um semimetal de Weyl sempre terá um número par de cones de Weyl e, conseqüentemente, uma quiralidade total igual a zero [61, 1]. A Figura 2.4 mostra as estruturas de bandas desses semimetais em comparação a um metal comum.

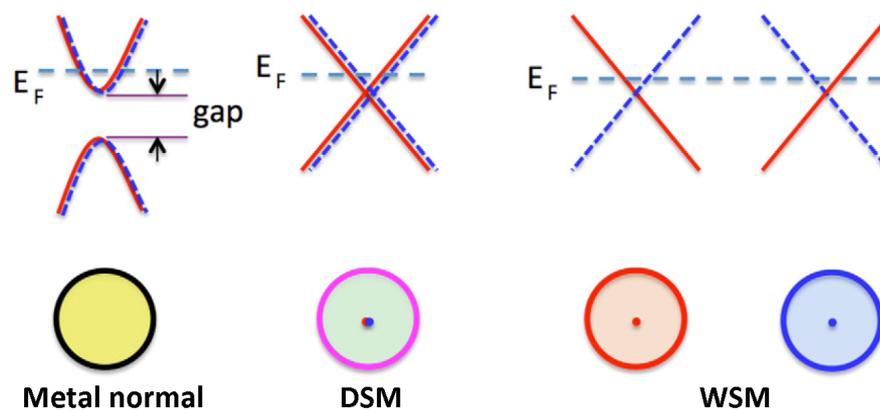


Figura 2.4: Esquema com a estrutura de bandas e a superfície de Fermi de um metal normal, um semimetal de Dirac e um semimetal de Weyl. O metal normal possui bandas parabólicas, o semimetal de Dirac possui bandas degeneradas com dispersão linear e o semimetal de Weyl possui pares de bandas com dispersão linear com quiralidades opostas. Figura retirada de [58].

A presença desse tipo de topologia no *bulk* faz com que surjam estados topológicos de superfície, como por exemplo arcos de Fermi, que permitem fluxo de carga entre cones, juntamente com várias propriedades incomuns como anomalia quiral e efeito Hall anômalo, entre outras [1]. É importante destacar que essas características aparecem mais intensamente quando os cones de Weyl estão próximos da energia de Fermi, já que é nela que ocorre o transporte elétrico. Dessa forma, o WSM ideal terá cones de Weyl nesse nível, sem nenhum estado trivial na superfície de Fermi, de forma que todas as propriedades elétricas serão devido a essa topologia [34]. Na prática, dificilmente isso acontece, deixando muitas vezes dúvidas se os

efeitos observados são realmente topológicos. Com isso, o uso da técnica de pressão uniaxial pode ser interessante para explorá-los melhor, tendo em vista que modificar a estrutura eletrônica do material possivelmente também modificaria seus efeitos, ajudando, assim, a identificar a origem deles.

### 2.2.2 Fase de Berry

Vários fenômenos e propriedades associados a materiais topológicos foram descobertos muito antes que o início dos conceitos de topologia. Os primeiros estudos lidaram com noções que só seriam bem definidas muito depois, como o conceito da fase de Berry em 1984 [42, 4]. Esse conceito pode ser entendido através de uma analogia geométrica, considerando um vetor se movendo na superfície de uma esfera ao longo de um caminho fechado, como na Figura 2.5. Apesar de que em nenhum ponto do trajeto o vetor foi rotacionado, houve uma rotação total de  $\alpha$  ao final, acumulada devido ao movimento em uma superfície curva [68, 70]. De maneira parecida, uma função de Bloch de um elétron percorrendo o espaço de momento em um cristal pode adquirir uma fase de Berry [59]. Seguindo a analogia, a fase geométrica é a integral da curvatura Gaussiana da superfície curva, enquanto a fase de Berry é a integral da curvatura de Berry [68], uma propriedade intrínseca da estrutura de bandas [59].

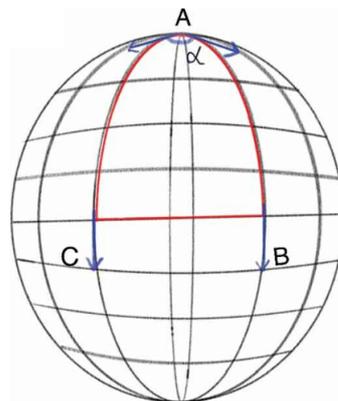


Figura 2.5: Ilustração de ganho de fase geométrica de um vetor através de um trajeto ao longo de uma superfície esférica, mesmo sem nenhuma rotação em torno do seu próprio eixo. Figura retirada de [68].

Uma forma como a curvatura de Berry pode ser entendida é considerando-a como um campo magnético fictício [43]. Em pontos de Weyl há uma singularidade, ou seja, monopolos no espaço de momento, podendo ser uma fonte ou um depósito da curvatura de Berry para quiralidades positiva e negativa, respectivamente [61]. Nesse caso, haverá um fluxo de Berry

entre os pontos de Weyl que resultará em uma fase de Berry não nula e, com isso, surgirão consequências observáveis, como no efeito Hall anômalo [6]. De maneira geral, a fase de Berry terá valor  $\pm\pi$  quando a órbita do elétron no espaço recíproco circular um cone de Weyl e, caso contrário, terá valor 0 [39].

## 2.3 Propriedades macroscópicas em materiais topológicos

O conceito de topologia não-trivial surgiu como forma de explicar algumas propriedades que até então não eram explicadas pela física. Sendo assim, é importante conhecer e entender essas propriedades para, então, conectá-las à topologia. Nesta seção serão abordadas algumas das propriedades macroscópicas que têm conexão com a topologia dos materiais.

### 2.3.1 Efeito Hall anômalo

Em 1879 Edwin H. Hall observou o que hoje é conhecido como efeito Hall, um acúmulo de cargas nas laterais de um condutor perpendicular a um campo magnético, devido à força de Lorentz [2], Figura 2.6. O lado em que as cargas se acumulam depende da forma como ocorre a condução no material, podendo ser com movimento de cargas negativas, através de elétrons, ou de cargas positivas, através de "buracos"[15]. Poucos anos depois, ele também observou que esse efeito era cerca de dez vezes maior em ferromagnetos, que posteriormente foi chamado de efeito Hall anômalo (AHE) [42].

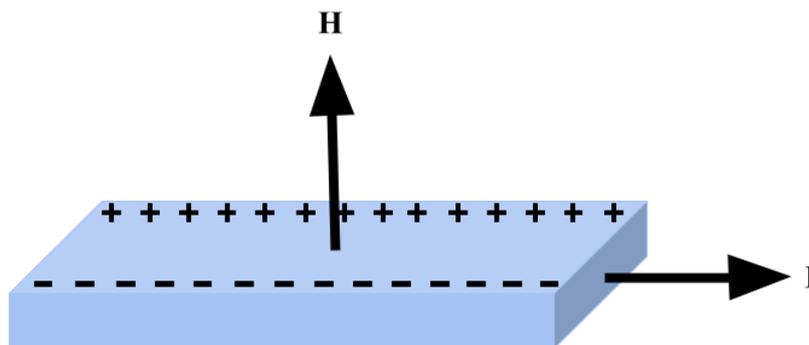


Figura 2.6: Acúmulo de cargas na lateral de um condutor após aplicação de um campo magnético  $H$  perpendicular à corrente  $I$ , conhecido como efeito Hall.

Como o efeito Hall é regido pela força de Lorentz, a resistividade Hall  $\rho_{xy}$  depende linearmente do campo magnético  $B_z$ . Já no AHE,  $\rho_{xy}$  cresce abruptamente em baixo  $B_z$ , saturando

em um alto valor praticamente independente do campo. Dentre as principais contribuições para a condutividade Hall anômala  $\sigma_{xy}^{AH}$  está a contribuição intrínseca [42], que muitas vezes está relacionada à curvatura de Berry.

A contribuição intrínseca de  $\sigma_{xy}^{AH}$  depende apenas da estrutura de bandas do material e independe do espalhamento, ou seja, não depende da condutividade longitudinal  $\sigma_{xx}$ . É comum, nesses casos, considerar a origem intrínseca como dominante no AHE [42]. É dito que uma velocidade anômala é adicionada aos portadores de carga devido à curvatura de Berry na presença de um campo elétrico, gerando um acúmulo de cargas espontâneo nas laterais e quase independente de  $B_z$ .  $Mn_3Sn$  e  $GdPtBi$  entram nessa categoria, apresentando AHE que podem ser diretamente associados à curvatura de Berry presente em suas estruturas de banda.

### 2.3.2 Oscilações quânticas

Em 1930, Landau previu que o movimento de cargas em um plano perpendicular ao campo magnético era quantizado, dependente do valor do campo magnético [45, 24]. Dessa forma, o movimento de cargas na superfície de Fermi (FS) de um material também é quantizado e isso afeta suas propriedades. Na prática, ao variar a intensidade do campo magnético, surgirão, na maioria das grandezas mensuráveis, oscilações periódicas em função do inverso do campo magnético ( $1/B$ ), conhecidas como oscilações quânticas (QO) [7]. Suas primeiras observações experimentais foram feitas por medidas de magnetização (efeito de Haas-van Alphen) e medidas de magnetorresistência (efeito Shubnikov-de Haas), mas não se limitam a elas [68]. A Figura 2.7 ilustra como esses efeitos acontecem. A variação do campo magnético faz com que os níveis de Landau se afastem, aumentando o raio do movimento ciclotron e fazendo com que eles ultrapassem os limites da FS. Sempre que o raio desse movimento coincide com a área máxima da seção transversal perpendicular a  $B$  da FS, a densidade de estados atinge um máximo, resultando em um máximo na oscilação [68].

Tendo em vista que a topologia tem totalmente a ver com a estrutura eletrônica do material, especialmente na FS, analisar as QOs é um meio efetivo de se obter informações diretamente da topologia do material. É importante mencionar que, devido a efeitos térmicos e de impurezas, os níveis de Landau podem ser dispersos, de forma a restringir a observação das oscilações a baixas temperaturas, a amostras puras e a altos campos magnéticos [7].

A expressão para a oscilação quântica que aparece na resistividade pode ser aproximada para a equação [68]:

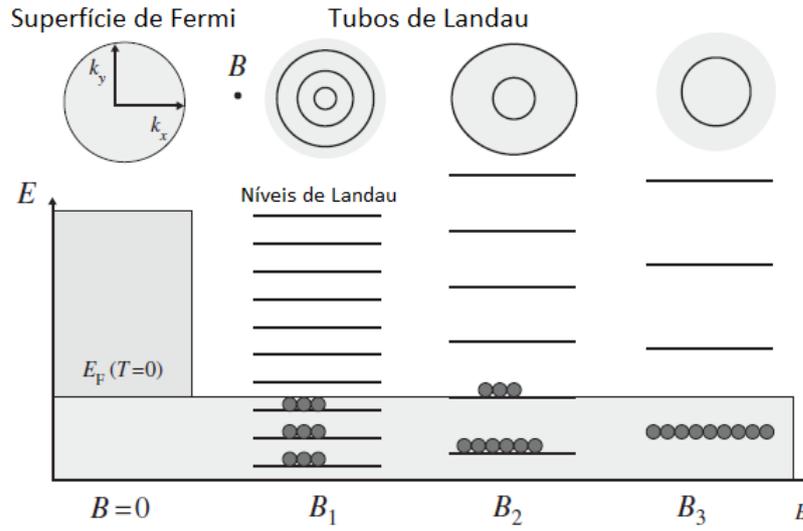


Figura 2.7: Ilustração da origem das oscilações quânticas. Os níveis de Landau variam com a aplicação de campo magnético, limitando a ocupação dos elétrons. Quando o raio de ocupação do elétron coincide com os limites da superfície de Fermi, será um ponto de máximo da oscilação. Aumentando o campo magnético, os elétrons passarão a ocupar níveis menores com raios menores, gerando movimento oscilatório. Figura retirada de [7].

$$\tilde{\rho} \propto R_D R_T R_S \sin\left(\frac{2\pi F}{B} + \pi - \Phi_B - 2\pi\delta\right), \quad (2.2)$$

sendo  $F$  a frequência da oscilação,  $\Phi_B$  a fase de Berry,  $\delta$  uma fase adicional que depende da dimensionalidade e  $R_D$ ,  $R_T$  e  $R_S$  fatores de amortecimento devido ao espalhamento de impurezas, à temperatura e ao *spin splitting*, respectivamente [7].  $\delta$  varia de 0 para uma FS 2D cilíndrica até  $\pm 1/8$  para uma FS 3D ondulada [16]. A partir da frequência é possível obter a área  $A_k$  da seção transversal da FS perpendicular ao campo magnético, através da relação de Onsager [7]

$$F = \frac{\hbar}{2\pi e} A_k, \quad (2.3)$$

sendo  $e$  a carga do elétron e  $\hbar$  a constante de Planck reduzida. Variando-se a temperatura, é também possível obter a massa efetiva  $m^*$  dos elétrons através da equação [68]

$$R_T = \frac{\chi}{\sinh\chi}, \quad \text{com } \chi = \frac{2\pi^2 k_B T m^*}{e\hbar B}, \quad (2.4)$$

sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann. Essas equações foram ferramentas importantes no estudo da FS do GdPtBi sob pressão uniaxial.

### 2.3.3 Magnetorresistência negativa

De maneira geral, condutores quando sujeitos a campo magnético tendem a aumentar a resistência, na maioria das vezes, em formato parabólico [44]. Isso está conectado com a força de Lorentz com o campo magnético, que desvia as cargas gerando movimentos circulares que aumentam a probabilidade de espalhamento, dificultando a condução. Em semimetais de Weyl pode acontecer diferente e aparecer uma magnetorresistência (MR) negativa. Quando sujeito a um campo magnético, os níveis ocupados pelas cargas se tornam quantizadas, de forma que há uma dispersão linear com sentidos opostos nos pontos de Weyl, de acordo com a quiralidade, como na Figura 2.8. No limite quântico de altos campos magnéticos e baixas temperaturas, o nível de Fermi estará no nível de Landau  $N = 0$  e, com isso, dois pontos de Weyl de quiralidades opostas podem ter trocas de partículas [27]. A aplicação de um campo elétrico paralelo a este campo magnético gera uma corrente quiral, que é manifesta na forma de MR negativa, gerando o efeito de anomalia quiral [60].

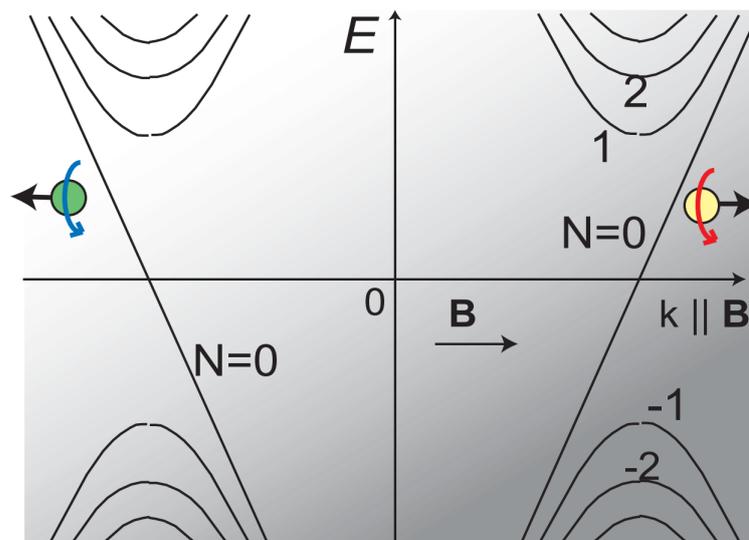


Figura 2.8: Par de cones de Weyl após aplicação de um campo magnético  $B$ . As linhas indicam os níveis de Landau  $N$  e as bolas verde e amarela indicam quiralidades opostas. Figura retirada de [60].

Um material ter MR negativa associada à anomalia quiral é uma evidência muito forte de que se trata de um WSM. Entretanto, MR negativa não se origina unicamente desse efeito, exigindo que essa medida seja acompanhada de outras informações que reforçam essa análise. Uma forma de elucidar isso é, por exemplo, verificar a dependência angular, de forma que o efeito é maximizado com o campo elétrico paralelo ao campo magnético ( $E \parallel B$ ), e a dependência da condutividade elétrica  $\sigma$  com o campo magnético  $B$  e com a densidade de portadores  $n$

( $\delta\sigma(B) \propto B^2/n^{2/3}$ ). Também é possível buscar mais informações sobre a superfície de Fermi em outros experimentos, tendo em vista que um conhecimento detalhado da topologia da FS facilita a conexão entre MR negativa e a anomalia quiral [61].

MR negativa foi observada principalmente em dois tipos de WSMs: os que não possuem simetria de inversão, e os que são induzidos pela quebra da simetria de reversão temporal, como, por exemplo, semimetais de Dirac sob aplicação de campo magnético. O GdPtBi, que faz parte deste estudo, entra nesta última categoria [50], apresentado MR bastante negativa [49].

## 2.4 Difração de raios X

Quando raios X são incididos em um átomo, eles são espalhados para todas as direções. Ao incidir um feixe de raios X em um cristal, haverá interação com vários átomos ao mesmo tempo, resultando em raios X espalhados com trajetórias diferentes que geram interferências. A difração acontece quando um grande número de raios X espalhados interferem construtivamente em uma direção, gerando um feixe intenso. A condição necessária para que isso aconteça é dada pela lei de Bragg [8].

Considere um cristal com conjunto de átomos arranjados em planos paralelos com distância  $d$ , desenhados perpendicularmente à página na Figura 2.9. Os raios X monocromáticos incidentes com ângulo  $\theta$  na primeira camada vão ser espalhados para todas as direções, mas é no espalhamento também com ângulo  $\theta$  em relação ao plano em que esses raios vão se adicionar construtivamente, gerando um feixe intenso. Isso acontece por eles percorrem a mesma distância, independente de qual átomo causou o espalhamento, se mantendo, assim, exatamente com a mesma fase. Olhando para o espalhamento nas camadas inferiores, para que também haja uma contribuição positiva nessa mesma direção, é preciso que a diferença de percurso seja múltiplo inteiro  $n$  do comprimento de onda  $\lambda$  do feixe incidente, para que fiquem em fase. Pela Figura 2.9 é possível observar que a diferença de trajeto na segunda camada é  $2d\sin\theta$  e, assim, obtém-se a lei de Bragg [8]:

$$n\lambda = 2d\sin\theta. \quad (2.5)$$

Essa relação mostra a condição que deve ser satisfeita para a difração ocorrer.

Observando a lei de Bragg é possível notar que a difração de raios X é uma ferramenta muito importante para estudar estrutura de cristais, tendo em vista que é possível obter as dis-

tâncias interplanares do material. Neste estudo a difração de raios X foi utilizada para identificar as fases cristalinas obtidas, para orientar os monocristais e para observar o comportamento estrutural com pressão uniaxial.

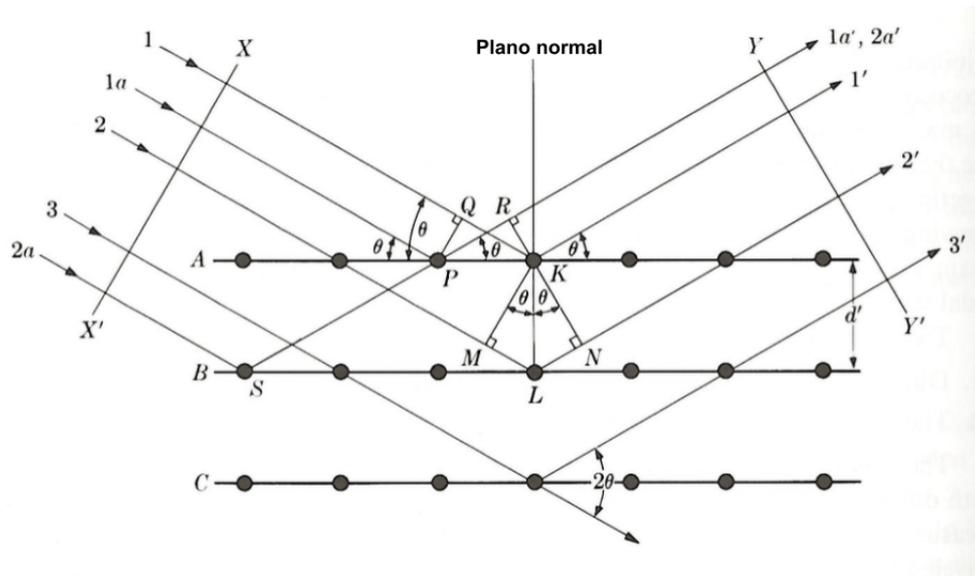


Figura 2.9: Esquema da difração de raios X com planos atômicos perpendiculares à figura. Os raios X incidentes nos átomos se espalham gerando interferência construtiva com um ângulo de  $2\theta$  da trajetória inicial. Retirado de [8].

## Capítulo 3

# Técnicas Experimentais

Este capítulo expõe as técnicas experimentais e equipamentos utilizados para desenvolvimento deste estudo. Todas as etapas foram realizadas pelo aluno e, para isso, diversos treinamentos foram realizados para que ele obtivesse domínio de cada técnica.

### 3.1 Síntese de monocristais por fluxo metálico

Para obter os cristais de  $Mn_3Sn$  e  $GdPtBi$  foi utilizada a técnica de síntese por fluxo metálico, que consiste em utilizar um metal fundido como solvente para os outros elementos. A ideia é que haja uma supersaturação da solução, nesse caso causada por esfriamento, fazendo com que o soluto se precipite na forma de cristais. Para que haja estabilidade no crescimento e, conseqüentemente, monocristais maiores e com menos defeitos, esse esfriamento deve ser, em geral, feito de maneira lenta [13]. Após o tratamento térmico, o excesso de fluxo é, então, separado dos monocristais.

Essa técnica se destaca por possibilitar crescimentos de cristais em temperaturas, na maioria das vezes, mais baixas que as de fusão dos elementos envolvidos. Isso é importante porque possibilita síntese de materiais com equipamentos menos sofisticados e mais acessíveis do que algumas outras técnicas exigem. Além disso, por ter uma tensão térmica menor, um crescimento em menor temperatura costuma gerar monocristais com maior qualidade. Para completar, muitas impurezas são removidas juntamente com excesso de fluxo.

No GPOMS, o procedimento costuma ser feito com a utilização de um cadinho de alumina ( $Al_2O_3$ ), onde são inseridos os materiais na devida estequiometria. Para evitar a oxidação dos materiais, o cadinho é selado, com a ajuda de um maçarico, em um tubo de quartzo ( $SiO_2$ ) a

vácuo ou preenchido com um gás inerte. Antes de selar, coloca-se um pouco de lã de quartzo embaixo e em cima do cadinho, embaixo para evitar uma tensão devido às diferenças de expansão térmica da alumina e do quartzo, e em cima para posteriormente servir de filtro durante a separação do fluxo. Um tratamento térmico é feito, então, com aquecimento até uma temperatura na qual o material se torna completamente uma solução líquida, seguido de um resfriamento lento o suficiente para monocristais se formarem. Após isso, ainda com o fluxo em estado líquido, a ampola é colocada em uma centrífuga para que este seja separado dos cristais antes de solidificar. Um esquema com os procedimentos envolvidos é mostrado na Figura 3.1.

O fluxo, a estequiometria e o tratamento térmico foram determinados a partir de análise dos diagramas de fases binários dos elementos envolvidos. No caso deste trabalho, todos os materiais envolvidos puderam ser obtidos com autofluxo, ou seja, um dos elementos do material pôde ser utilizado como fluxo, estando em excesso em relação à estequiometria do cristal desejado.

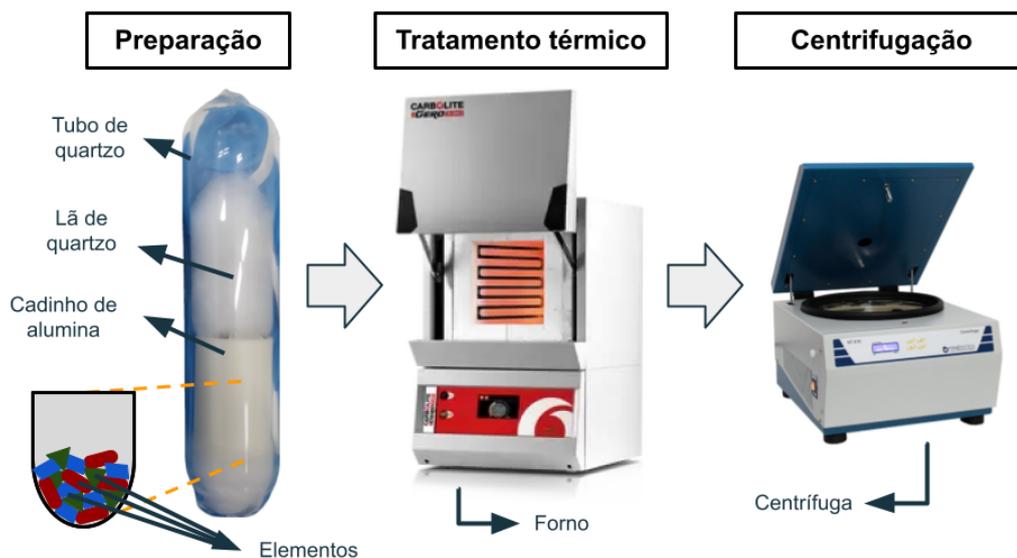


Figura 3.1: Etapas para síntese de monocristais por técnica de fluxo metálico, começando pela preparação da ampola com os materiais, seguindo para um tratamento térmico e, por fim, utilização de uma centrífuga para separar os cristais do fluxo.

## 3.2 Difração de pó de raios X

A principal técnica utilizada para identificar as fases cristalinas obtidas após o crescimento das amostras foi a difração de pó de raios X (DRX), através de um difratômetro Bruker D2 PHASER, Figura 3.2(a), operado na geometria Bragg-Brentano, Figura 3.2(b). Além disso, refinamento de Rietveld, método matemático que calcula picos de difração teóricos que se aproximam o máximo possível do padrão de difração medido, foi realizado para obter informações quantitativas do material, como por exemplo os parâmetros de rede do cristal.

A base do experimento de DRX está na lei de Bragg, que relaciona o comprimento de onda incidente, a distância entre os planos cristalinos e o ângulo de difração construtiva. Como se trata de uma amostra em pó, o feixe de raios X difratado pode ser observado no mesmo plano que o feixe de incidência. Assim, o difratômetro é construído para varrer ângulos mantendo a geometria de incidência  $\theta$  e difração  $2\theta$  em um mesmo plano que, tendo uma fonte de raios X monocromáticos, dará informação sobre as distâncias interplanares dos cristais, que serão característicos de cada fase cristalina. Um esquema dessa geometria é mostrado na Figura 3.2(b).

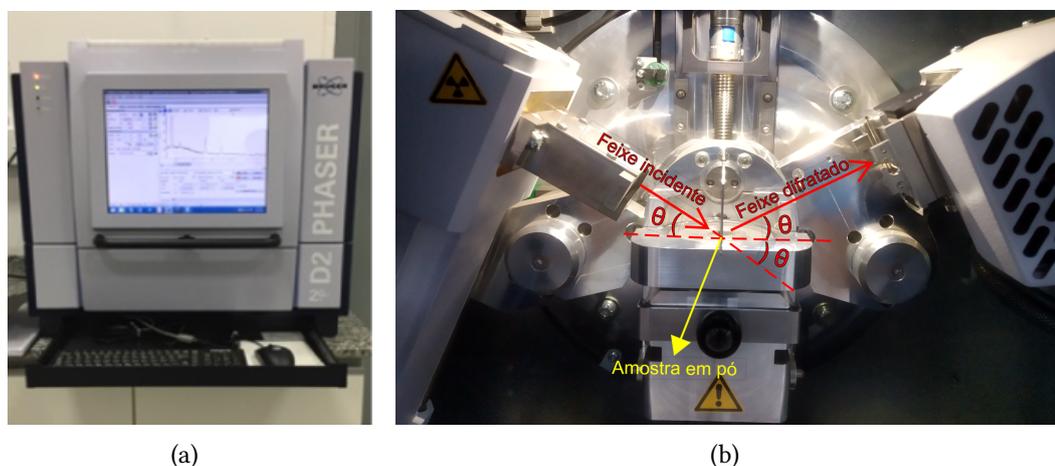


Figura 3.2: (a) Difratômetro Bruker para medidas de difração de pó de raios X disponível no DEQ, IFGW. (b) Esquema de difratometria de pó de raios X, onde o feixe incide no pó da amostra com ângulo  $\theta$  e difrata com ângulo  $2\theta$ .

Na prática, são selecionados monocristais limpos e livres de fluxo, que são, então, triturados em um almofariz até virarem pó. Para garantir que os grãos estejam pequenos o suficiente e gerar uma melhor estatística para a difração é utilizada uma peneira com  $210 \mu\text{m}$  de abertura durante a deposição do material no porta-amostra. Isso evita que haja direções preferenciais

na medida, prejudicando, assim, a identificação das fases cristalinas, especialmente se houver interesse em quantificar as proporções presentes.

### 3.3 Magnetização

Os materiais escolhidos para este estudo têm propriedades magnéticas importantes, portanto, para observar o caráter magnético das amostras sintetizadas, foram realizadas medidas de magnetização utilizando um MPMS3 (*Magnetic Property Measurement System*) da *Quantum Design*, Figura 3.3(a). Este sistema é composto por um magnetômetro de amostra vibratória (VSM) com um dispositivo supercondutor de interferência quântica (SQUID) como detector.

O equipamento utiliza como base a Lei de Faraday, que relaciona a variação no fluxo magnético de um circuito fechado e sua corrente induzida. A amostra é montada em uma haste de fibra de carbono inserida em um criostato e colocada para vibrar dentro de uma bobina captadora, Figura 3.3(b), sendo possível variar temperatura e campo magnético de acordo com o desejado. A vibração gera uma variação no fluxo magnético, induzindo uma corrente que é detectada pelo SQUID e, a partir disso, obtém-se o momento magnético do material.

Para o presente estudo analisamos a magnetização em função da temperatura, que costuma indicar transições de fases magnéticas através de picos ou mudanças abruptas. Essas transições ajudam a confirmar a fase cristalina sintetizada e ainda podem indicar características particulares do crescimento realizado que podem ser diferentes em outros estudos.

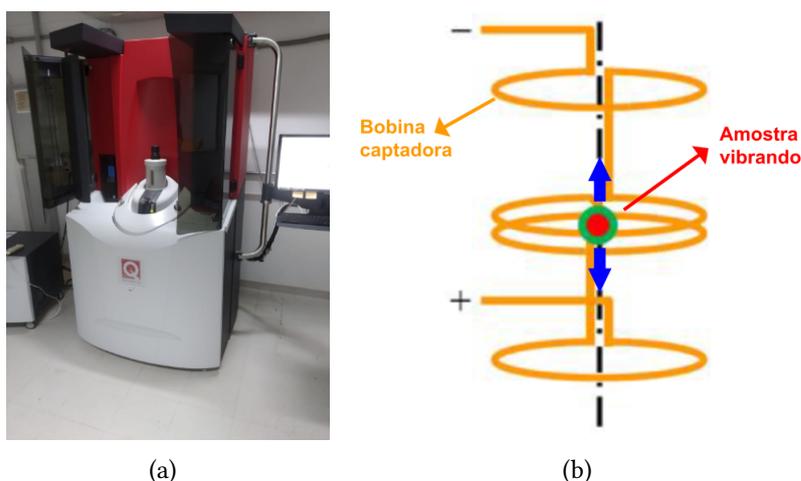


Figura 3.3: (a) MPMS3 usado para medidas de magnetização disponível no laboratório do GPOMS, IFGW. (b) Esquema com amostra oscilando na bobina captadora no MPMS3, onde seu movimento altera o fluxo magnético na bobina, gerando corrente dependente da magnetização detectada pelo equipamento. Retirado de [38]

### 3.4 Transporte elétrico

A caracterização elétrica das amostras foi feita em um PPMS (*Physical Property Material System*), o qual permite um controle de temperatura e de campo magnético aplicado, Figuras 3.4(a). Para isso foi utilizado um módulo de transporte AC. As principais medidas realizadas foram resistividade em função da temperatura (sem campo magnético aplicado) e em função do campo magnético em uma temperatura fixa, aplicando 1 mA de corrente com uma frequência de 17 Hz.

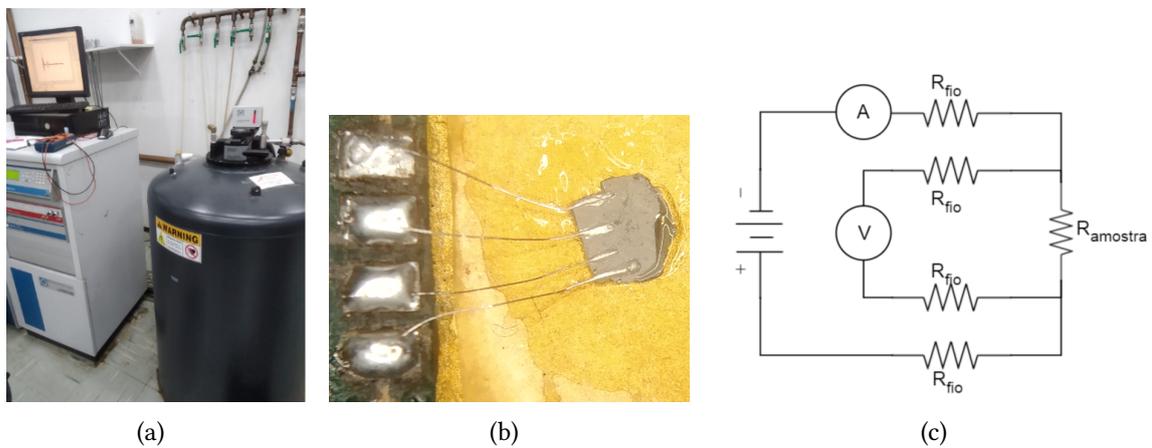


Figura 3.4: (a) PPMS usado para medidas de transporte elétrico, disponível no GPOMS, IFGW. (b) Amostra montada com quatro contatos em uma *puck* de resistividade. (c) Esquema do método de quatro pontas para medir resistividade, onde a contribuição da resistência dos fios é minimizada pelo fato de se passar corrente em fios separados da medida de tensão.

Nas medidas de resistividade foi empregado o método de quatro pontas para minimizar a influência da resistência dos contatos nas medidas. Observe nas Figuras 3.4(b) e 3.4(c) que os dois fios externos são usados para injetar corrente através da amostra, enquanto os outros dois internos medem a tensão elétrica. Como a corrente passa por fios separados, a medida de tensão elétrica é direta na resistência da amostra, dando uma precisão muito maior.

Uma das partes fundamentais deste estudo está relacionada com o efeito Hall. Para fazer essa medida também foi utilizado o método de quatro pontas, com a diferença de que, ao invés de posicionar os fios de tensão elétrica ao longo da direção da corrente, eles são posicionadas transversalmente. Assim, a resistividade Hall será medida com a aplicação de um campo magnético perpendicular tanto à corrente como à medida de tensão elétrica, alinhados aos eixos chamados arbitrariamente de  $z$ ,  $x$  e  $y$ , respectivamente. Como há interesse em medir tanto a resistividade longitudinal como a transversal, algumas das montagens foram adaptadas para

seis contatos, como na Figura 3.5. Dessa forma, compartilha-se os contatos de corrente para poder medir numa mesma montagem as duas resistividades.

Pela 3.5(b) é possível notar que o tamanho dos fios e dos contatos não são desprezíveis em relação às distâncias entre eles. Dessa forma, se for considerado o tamanho desses contatos como erro nas distâncias dos contatos, utilizadas para calcular a resistividade, haverá um erro da mesma ordem ou maior que os valores das resistividades. Entretanto, como essa fonte de erro age de maneira igual em todos os dados de cada experimento, foi desconsiderado esse erro sem nenhuma perda na análise qualitativa dos dados, apenas com perda no valor absoluto das resistividades. Essa proximidade também faz com que qualquer desalinhamento gere nos resultados contribuições misturadas das resistividades longitudinal e Hall. Para corrigir e minimizar esses desalinhamentos, as medidas foram feitas varrendo o campo magnético tanto em valores positivos como negativos. Com isso, foi feita uma simetrização nas curvas positiva e negativa da resistividade longitudinal, a fim de eliminar a contribuição Hall, enquanto foi feita uma antissimetrização nas medidas Hall com o intuito de eliminar a contribuição longitudinal. As equações que geram os resultados mostrados são as seguintes:

$$\rho_{xx}^{\text{Simetrizado}} = \frac{\rho_{xx}(B) + \rho_{xx}(-B)}{2}, \quad \rho_{xy}^{\text{Antissimetrizado}} = \frac{\rho_{xy}(B) - \rho_{xy}(-B)}{2} \quad (3.1)$$

sendo  $B$  o campo magnético aplicado. O cálculo da resistividade é feita a partir da resistência  $R$  medida, da área  $A$  da seção transversal da amostra e da distância  $L$  dos contatos de tensão elétrica, pela equação

$$\rho = \frac{A * R}{L}. \quad (3.2)$$

### 3.5 Pressão uniaxial

Pressão uniaxial se refere a uma pressão aplicada em apenas uma direção. Quando se trata de monocristais, a ideia é poder deformar a célula unitária em uma determinada direção, modificando sua estrutura, não apenas seu tamanho. Modificações desse tipo são muito interessantes porque afetam a estrutura eletrônica do composto, da qual se originam as propriedades topológicas.

Dependendo do interesse de pesquisa, a pressão uniaxial pode ser tanto no sentido positivo de deformação do material, como no sentido negativo. Dessa forma, para melhor entendimento do texto, serão utilizados os termos tensão e compressão para deformações positivas

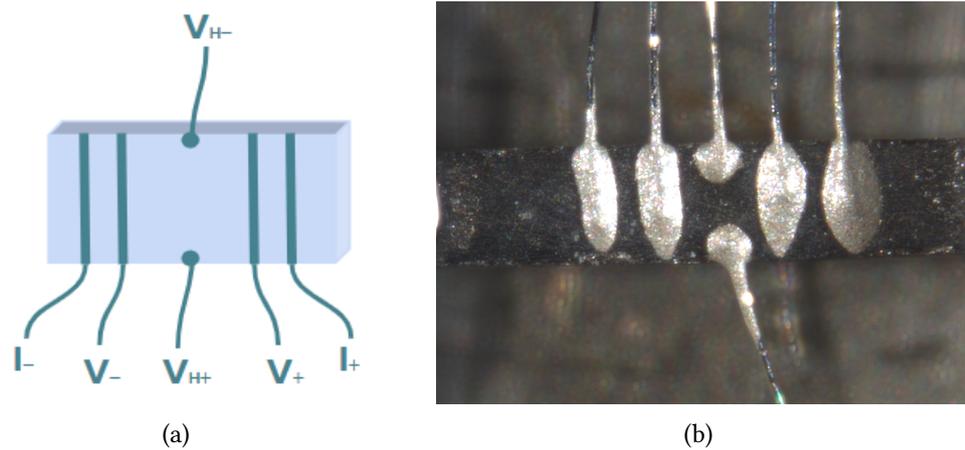


Figura 3.5: (a) Esquema para medir resistividade longitudinal e resistividade Hall utilizando 6 contatos elétricos. É utilizado o método de quatro pontas tanto para medir a resistividade longitudinal como a Hall, utilizando os mesmos fios para aplicar corrente, mas com fios de tensão alinhados transversalmente no caso do Hall. (b) Amostra preparada com 6 contatos elétricos.

e negativas, respectivamente. De maneira complementar, optou-se pela utilização do termo pressão uniaxial como tradução direta de *uniaxial strain* devido a inexistência de uma palavra equivalente no português.

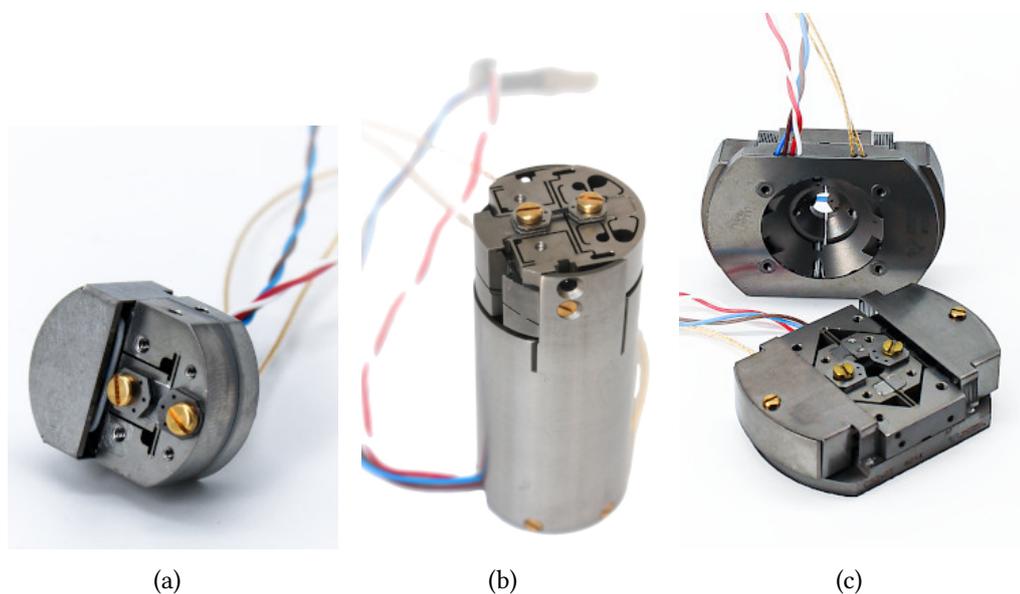


Figura 3.6: Células de pressão uniaxial (a) CS100, (b) FC100 e (c) CS200T. Imagens retiradas de [46].

### 3.5.1 Células de pressão uniaxial

As células de pressão uniaxial utilizadas foram dos modelos CS100, FC100 e CS200T da *Razorbill Instruments* (Figura 3.6). Elas utilizam três dispositivos piezoelétricos para aplicar pressão uniaxial, de forma a trabalhar em dois canais, um com os dispositivos externos e outro com o interno, conforme a Figura 3.7. Esses dispositivos piezoelétricos possuem a propriedade de expandirem ou contraírem de acordo com a tensão elétrica aplicada. Pelo esquema em que são organizados, o canal externo é o de tensão, enquanto o interno é o de compressão, ou seja, aplicar tensão elétrica positiva no canal externo tensiona a amostra, enquanto uma tensão elétrica positiva no canal central a comprime.

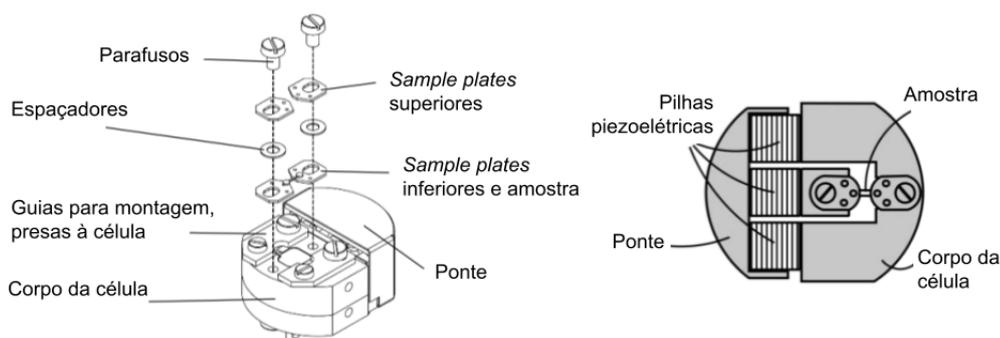


Figura 3.7: Esquema da célula de pressão uniaxial baseada em piezoeletricidade. À esquerda está detalhado como as peças são encaixadas na montagem da célula. À direita está uma visão de onde ficam os dispositivos piezoelétricos para possibilitar aplicação de pressão uniaxial. Retirado de [40].

Apesar de as três células funcionarem a partir do mesmo princípio, os seus formatos são bem diferentes, cada uma projetada para possibilitar diferentes experimentos. A CS100 é uma célula mais compacta e versátil, com deslocamento de  $\pm 6 \mu\text{m}$ . É possível usá-la em medidas de DRX, principalmente por refletividade, ou em medidas de resistividade em duas configurações diferentes, podendo variar a direção da corrente em relação ao campo magnético. Já a FC100 é mais robusta e voltada para medidas de resistividade. Ela possui um deslocamento um pouco maior, de  $\pm 10 \mu\text{m}$ , tendo um diferencial de medir a força aplicada na amostra ao invés do deslocamento dos dispositivos piezoelétricos. Por fim, com deslocamento de  $\pm 20 \mu\text{m}$ , a CS200T

é voltada para medidas de DRX, tendo uma abertura angular maior, possibilitando acesso a mais planos cristalinos, tanto por reflexão como por transmissão.

Para ter controle da deformação, as células utilizam capacitores de placas paralelas, relacionando a capacitância com o deslocamento dos dispositivos piezoelétricos ou, no caso da FC100, com a força. Assim, para medir essa capacitância, cuja variação é da ordem de 100 fF, foi utilizado um amplificador Lock-In DSP SR830. Foi, então, aplicada uma tensão de 0,5 V a uma frequência de 930Hz para obter a amplitude da corrente e, com isso, calcular a capacitância através da seguinte equação:

$$C = \frac{I}{2\pi fV} \quad (3.3)$$

sendo  $C$  a capacitância,  $I$  a corrente,  $f$  a frequência e  $V$  a tensão aplicada. A relação entre a capacitância e o deslocamento, para as células CS100 e CS200T, segue a equação:

$$d = \frac{\epsilon_0 A}{C} \quad (3.4)$$

onde  $d$  é a distância entre as placas paralelas,  $\epsilon_0$  a permissividade elétrica do vácuo e  $A$  a área das placas.

É possível observar pelo esquema da Figura 3.7 que a amostra precisa estar num formato adequado para ser montada. O ideal é que ela tenha um formato paralelepipedal com dimensões próximas de 2 mm de comprimento, 250  $\mu\text{m}$  de largura e 170  $\mu\text{m}$  de espessura, como na Figura 3.8. A célula possui pequenos ajustes que permitem dimensões um pouco diferentes e até outros formatos, mas neste trabalho todas as amostras foram montadas nas células conforme recomendado. Como existe essa restrição de formato e tamanho, em geral é necessário fazer um polimento do cristal para que ele fique nas dimensões especificadas para sua montagem na célula. Portanto, utilizou-se um polidor manual para efetuar o desgaste das amostras e obter cristais com faces paralelas.



Figura 3.8: Formato de amostra recomendado para montagem da célula de pressão uniaxial.

### 3.5.2 Montagem da amostra na célula de pressão uniaxial

O procedimento para montagem da amostra na célula de pressão uniaxial varia de acordo com o modelo, mas sempre segue o mesmo princípio. Em geral, primeiro é necessário fixar a célula em um suporte adequado para que ela fique na vertical, firme e estável. Em seguida, são colocadas as guias nos lados da célula, deixando os parafusos folgados. As *sample plates* inferiores são, então, colocadas com a distância desejada para encaixar a amostra, apertando as guias para alinhá-las corretamente e deixá-las fixas. Antes de adicionar a amostra, coloca-se uma camada da epóxi *Stycast 2850 FT* onde ficarão as pontas do cristal, como mostrado na Figura 3.9(a). Posicionando a amostra adequadamente, Figura 3.9(b), adiciona-se mais epóxi, de forma que envolva totalmente a amostra, Figura 3.9(c). Depois de colocar os espaçadores alinhados com os buracos de parafuso, colocam-se as *sample plates* superiores alinhadas com as de baixo, podendo ser necessário folgar uma das guias, mas apertando-as de novo em seguida. Por fim, os parafusos principais são colocados com bastante cuidado, mantendo o alinhamento de todas as peças, Figura 3.9(d). Para secagem, a célula é colocada em uma estufa a 60°C por pelo menos 4 horas e, para compensar a expansão térmica da amostra, é aplicada uma tensão elétrica durante a secagem, aumentando a abertura, geralmente com 10V. Após o

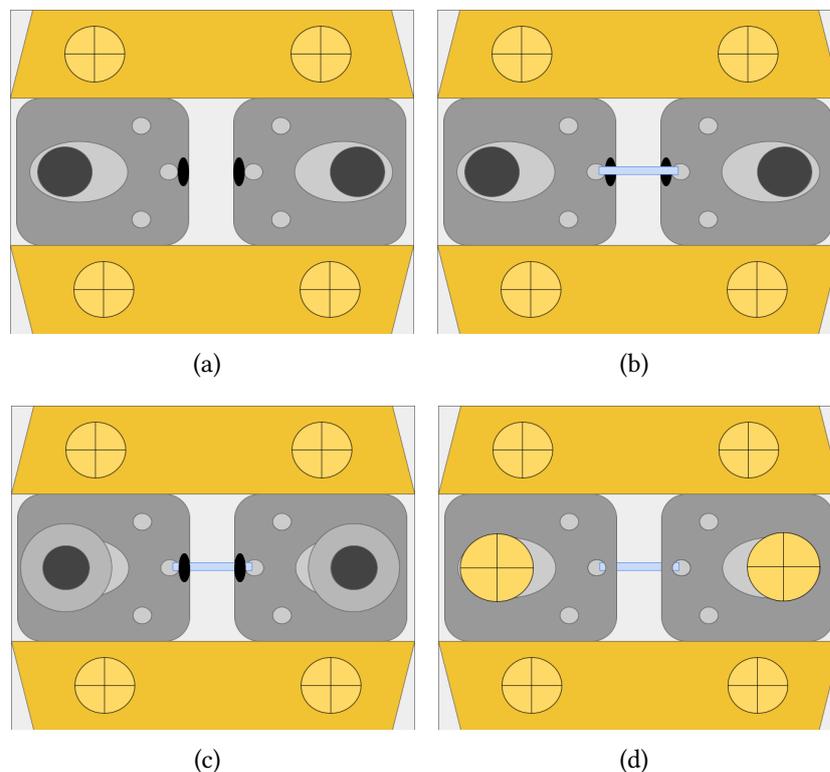


Figura 3.9: Passo a passo da montagem da célula de pressão uniaxial.

procedimento, a tensão elétrica e as guias podem ser retiradas e a célula estará pronta para uso.

Esse procedimento não é único e pode ser adaptado para montagens diferentes, mas vale destacar a importância de deixar tudo muito bem alinhado para que haja uma uniformidade durante a deformação, tanto evitando a quebra da amostra quanto garantindo mais precisão aos dados. Também a fim de gerar uma maior uniformidade, é importante se certificar de que há *Stycast* suficiente para circular toda a amostra nas pontas, mas sem deixar que se espalhe para o meio. Após remover as guias, caso seja necessário, é possível adicionar mais *Stycast* nas laterais, sem a necessidade de recolocar as guias ou aplicar tensão elétrica durante a nova secagem.

### 3.5.3 Orientação dos cristais

Quando se trata de deformar um material em apenas uma direção é possível que haja comportamentos diferentes dependendo da direção escolhida. Dessa forma, é importante saber qual é a orientação do cristal para aplicação de pressão uniaxial, ficando mais objetivo e completo o estudo dessa deformação. Para fazer essa orientação o ideal é usar um equipamento que permite fazer Laue e, após encontrar a direção desejada, cortar o cristal. Por falta de acesso a esse tipo de equipamento, não foi possível realizar alinhamento dessa forma na maior parte deste estudo. Ainda assim, algumas adaptações foram feitas para se ter uma ideia da orientação dos cristais. Posteriormente, em um estágio no MPI CPfS, em Dresden, Alemanha, foi possível realizar novos experimentos com cristais devidamente orientados.

Um dos procedimentos adotados inicialmente foi manter uma das faces originais dos cristais preservada e, a partir dela, fazer o polimento. Para confirmar qual era esse plano, esses cristais foram colocados no difratômetro Bruker com a face preservada virada para cima e, se a face estivesse bem alinhada horizontalmente, era possível observar a reflexão nesse plano. Por exemplo, para o caso do  $Mn_3Sn$ , os cristais cresceram com estrutura hexagonal na direção do eixo  $c$ , de forma que era possível identificar claramente os planos  $(1\ 0\ 0)$  e  $(0\ 0\ 1)$ , apenas olhando pelo microscópio. Pelo difratômetro, foi possível confirmar os planos  $(1\ 0\ 0)$  e, posteriormente, o plano  $(0\ 0\ 1)$  foi confirmado no experimento de difração de raios X em monocristais. Já no caso do  $GdPtBi$  o cristal cresceu com estrutura cúbica, na direção  $(1\ 1\ 1)$ , mas só foi possível confirmar essa informação no experimento de difração de raios X em monocristais.

Em Dresden, foram orientados cristais através do método de reflexão de Laue. O experimento consiste em incidir um feixe policromático de raios X em um monocristal para identificar as direções dos feixes difratados. Para isso é colocado um filme sensível a raios X que, nesse caso, foi posicionado antes da amostra, capturando os feixes retroespalhados. Como a amostra está parada, os ângulos de incidência nos planos cristalinos não variam, fazendo com que apenas comprimentos de onda específicos satisfaçam a lei de Bragg nos respectivos planos e sejam difratados. Um esquema desse experimento é mostrado na Figura 3.10. O padrão de difração gerado no filme é particular de cada estrutura e forma uma espécie de mapa estrutural da amostra, possibilitando identificar sua orientação em relação a incidência do feixe.

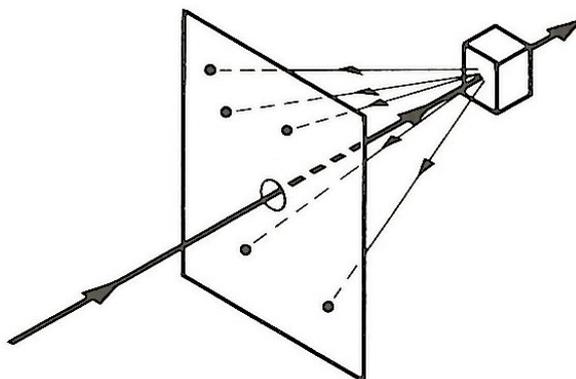


Figura 3.10: Representação do experimento de difração de Laue por reflexão utilizado para orientação de monocristais. Os feixes difratados, provenientes do feixe policromático incidido na amostra, geram um padrão de difração no filme fino posicionado antes da amostra, permitindo identificação da orientação do cristal. Retirado de [8].

#### 3.5.4 Medidas de difração de raios X em monocristais com pressão uniaxial

Com o intuito de estudar o comportamento estrutural de  $Mn_3Sn$  e  $GdPtBi$  sob pressão uniaxial, foi realizado experimento de difração de raios X em monocristais na linha EMA, Sirius (Proposta 20222153). As células de pressão uniaxial foram preparadas no LCTE, Sirius, e montadas em um Huber na EMA, que possui seis eixos de movimento, permitindo acesso a vários ângulos de difração, Figura 3.11. Em um desses eixos foi montado um detector de área, Pilatus 300K, com o qual foi efetuada a captura das imagens da difração. A energia do feixe síncrotron utilizado foi de 20 keV. Foram escolhidos alguns picos de difração em direções não colineares para obter informações sobre os diferentes eixos da célula unitária e, em torno

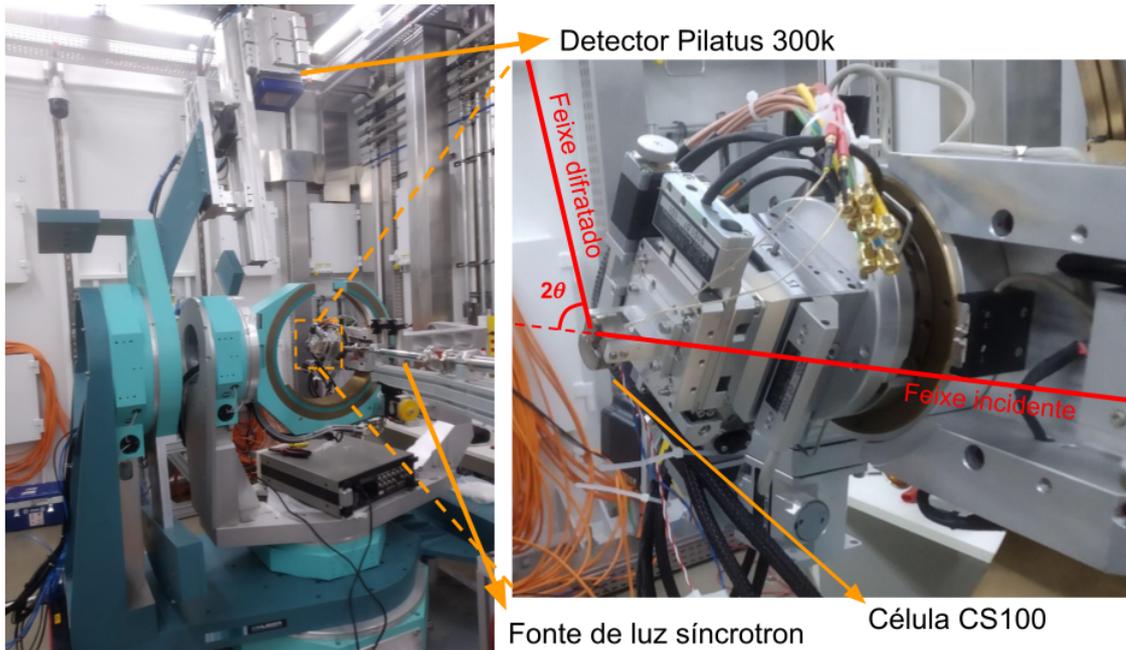


Figura 3.11: Montagem do experimento de difração de raios X em monocristais com pressão uniaxial na linha de luz EMA do Sirius.

de cada pico, foram feitas medidas variando os ângulos de incidência do feixe e do detector, mantendo a relação  $\theta$  e  $2\theta$ , respectivamente. A Figura 3.12 mostra um esquema de como a difração acontece nos planos com mesma direção que a deformação.

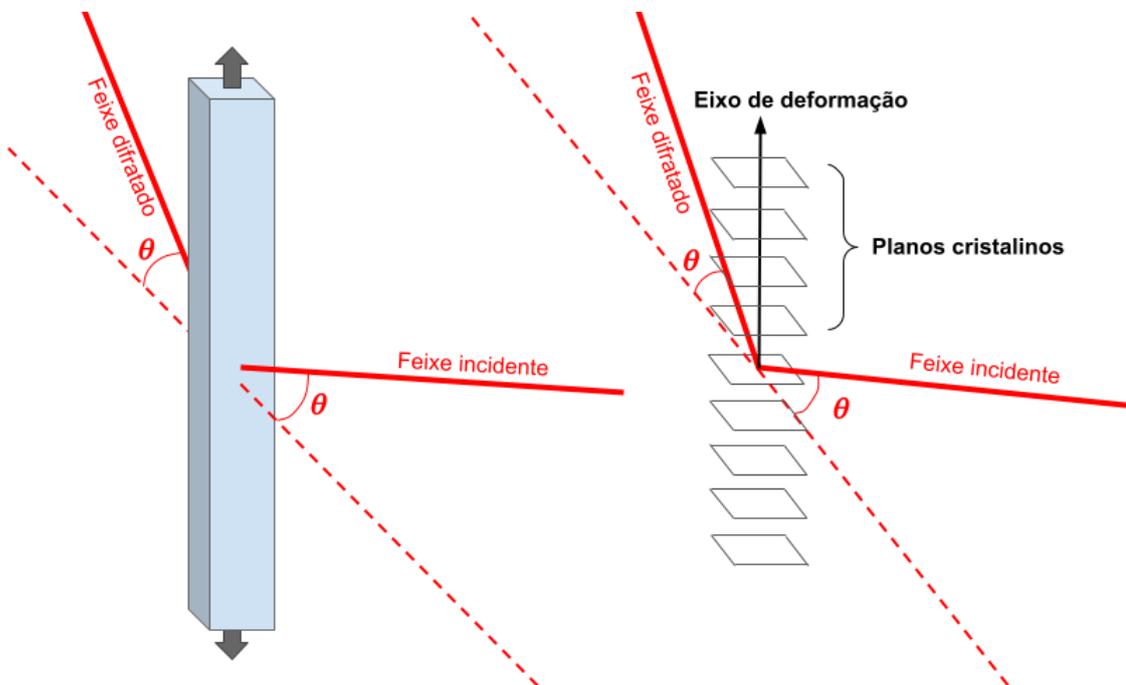


Figura 3.12: Esquema da difração de raios X do experimento na linha EMA do Sirius. Na figura está representada a difração ocorrida nos planos com a mesma direção da deformação, onde o feixe incide com ângulo  $\theta$  em relação ao plano e difrata também com ângulo  $\theta$  em relação ao plano.

A partir das imagens coletadas foi possível obter diferentes informações dependendo da região de interesse escolhida. Região de interesse (ROI) é um termo utilizado para denotar a área do detector da qual vão ser tiradas as informações. Isso é importante porque se trata de um detector plano não pontual, de forma que apenas um pixel estará exatamente alinhado a  $2\theta$ . As regiões de interesse escolhidas foram denotadas por ROI1 e ROI2. A primeira se trata de um quadrado de 100 pixels de lado com centro em  $2\theta$ , enquanto a segunda é uma linha de  $1 \times 100$  pixels, também centrada em  $2\theta$ , perpendicular à varredura. A ideia, nesse caso, é medir a intensidade total nessas regiões em função da varredura  $\theta$  e  $2\theta$ .

ROI1 é uma área na qual o pico estará presente durante toda a varredura, não dependendo da posição  $2\theta$  do detector. Isso é interessante para medir a intensidade e a largura dos picos, por exemplo. Já a ROI2 tem como objetivo manter um bom alinhamento com  $2\theta$ , trazendo mais precisamente as posições dos picos, que, por sua vez, podem ser usadas para calcular as distâncias interplanares da difração envolvida. A Figura 3.13 ilustra essas regiões de interesse.

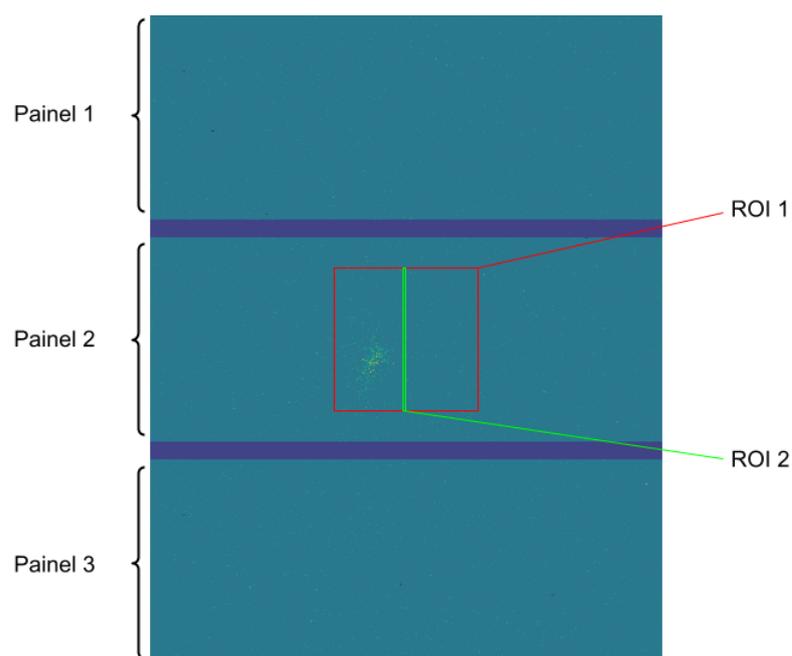


Figura 3.13: Imagem gerada pelo detector Pilatus 300K com regiões de interesse ROI1 e ROI2 indicadas.

### 3.5.5 Medidas de transporte elétrico com pressão uniaxial

Para medidas de transporte elétrico utilizaram-se as células CS100 e FC100. As preparações das amostras e montagens das células foram feitas no LCTE, Sirius. O preparo dos contatos elétricos se deu como nos experimentos sem pressão, entretanto, as *sample plates* da célula

cobrem parte da amostra, limitando, assim, a superfície útil para colagem dos fios. Isso, somado ao fato de a deformação ser menos homogênea próximo das pontas da amostra, fez com que os contatos tivessem que ser mais próximos do que o usual. Para isso, foi necessária a utilização de um micromanipulador, disponível no LCTE, Sirius, que permitiu a colocação dos contatos elétricos com maior precisão e menor distância entre eles.

A conexão com o PPMS foi feita através de uma *puck* adaptada e a conexão com a amostra foi feita usando *wiring platforms*. Também utilizou-se uma sonda especial adaptada para uso no PPMS, através da qual passam-se os fios do sensor capacitivo e da fonte da célula de pressão uniaxial. Um esquema com os acessórios e com a célula montada para medida de transporte é mostrado na Figura 3.14. A Figura 3.15 mostra uma visão geral do PPMS durante o experimento de transporte elétrico com pressão uniaxial.

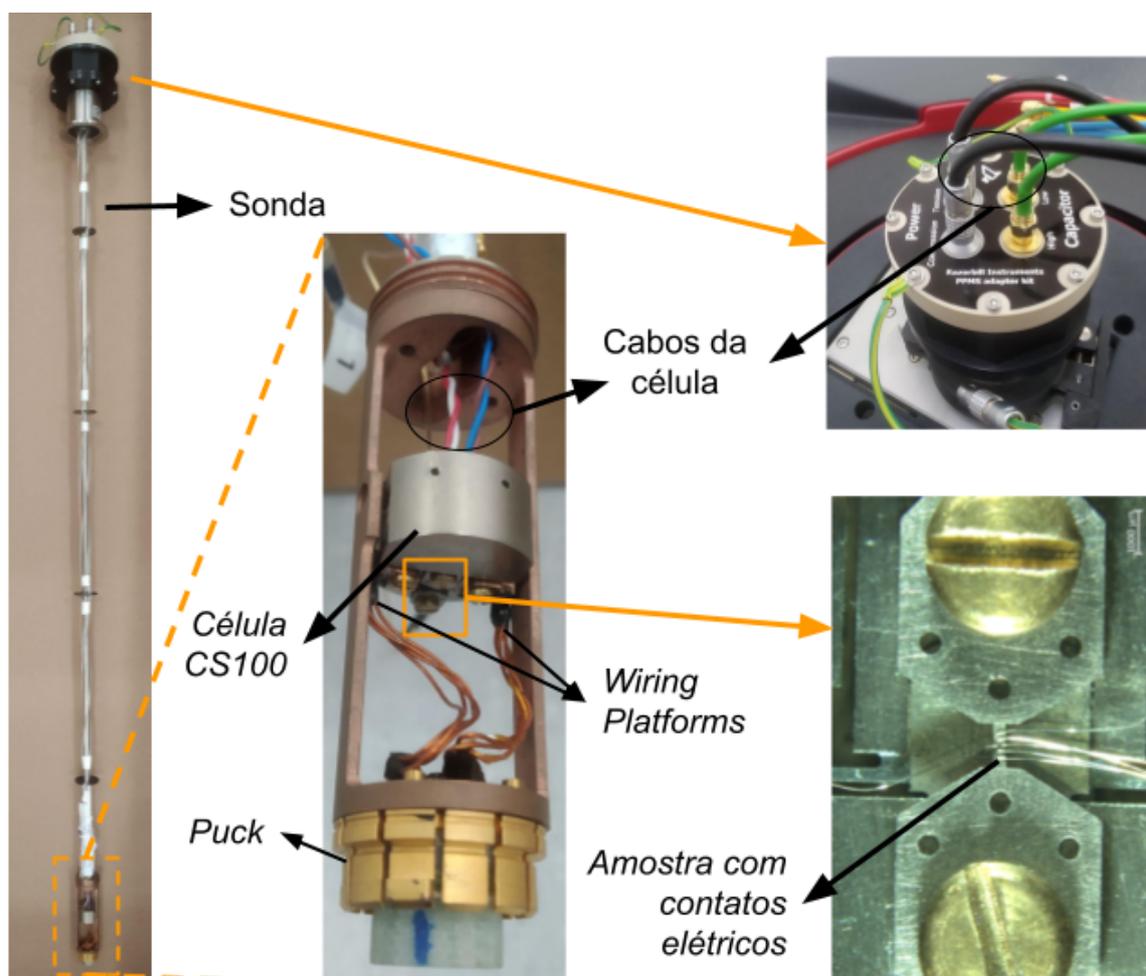


Figura 3.14: Esquema com acessórios utilizados para medir resistividade com pressão uniaxial no PPMS. A amostra é montada na célula de pressão uniaxial, com os contatos elétricos conectados à uma *puck* através de *wiring platforms*. A *puck* e a célula são fixos em uma sonda adaptada para encaixar em um PPMS, por meio da qual passam todos os fios que controlam a célula.

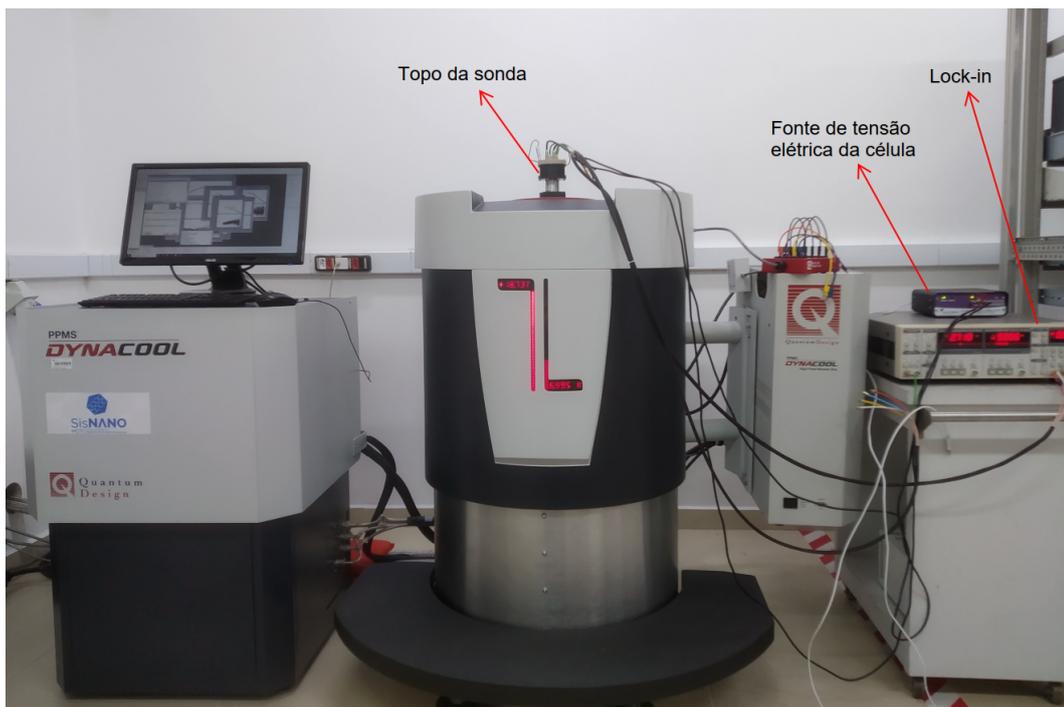


Figura 3.15: Montagem para experimento de transporte elétrico no PPMS DynaCool do LN-Nano, CNPEM.

Diferente das medidas de DRX, este experimento pode incluir variação de temperatura, o que traz um fator a mais na hora das medidas. Quando a temperatura varia há uma dilatação ou contração térmica do monocristal, fazendo com que a abertura da célula também varie, gerando uma tensão residual extra, de forma que não é possível determinar exatamente o zero equivalente à amostra sem pressão. Dessa forma, escolheu-se arbitrariamente  $\epsilon = 0\%$  como sendo a configuração em que não há tensão elétrica aplicada na célula. Além disso, para diminuir o risco de quebra e tentar manter um padrão parecido de deformações para as diferentes temperaturas, optou-se pela rotina de medir as diferentes compressões em cada temperatura e depois as tensões em cada temperatura. Os experimentos de transporte elétrico com pressão uniaxial foram realizados a maior parte no PPMS do LNNano, CNPEM (Proposta 20230919), e o restante na Unicamp, no PPMS do GPOMS, IFGW.

## Capítulo 4

### Mn<sub>3</sub>Sn

Mn<sub>3</sub>Sn cristaliza-se em estrutura hexagonal com grupo espacial  $P6_3/mmc$ , Figura 4.1(a). Os átomos de Mn formam camadas de rede do tipo kagomé empilhadas ao longo do eixo  $c$ , de forma que, abaixo de  $T_N = 420$  K, os momentos magnéticos ficam com alinhamento antiferromagnético triangular não colinear, Figura 4.1(b). Nesta fase aparecem algumas propriedades incomuns para antiferromagnetos, como efeito Hall anômalo (AHE) gigante, que está associado a presença de uma fase de Berry remanescente [17]. Outras transições magnéticas também podem ser observadas em 275 K e 200 K para alinhamentos espirais, e abaixo de 50 K para configuração *spin glass*, sendo que as duas primeiras só ocorrem em alguns crescimentos [63].

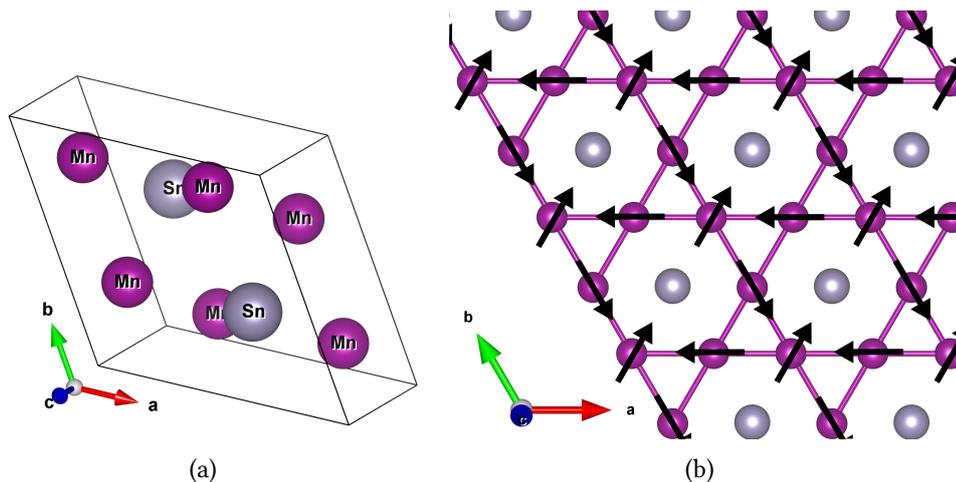


Figura 4.1: (a) Célula unitária e (b) estrutura antiferromagnética triangular do Mn<sub>3</sub>Sn.

O caráter topológico, evidenciado pelo efeito Hall anômalo, pode ser atribuído à estrutura triangular não colinear do material [36]. É previsto que essa estrutura induza uma formação de grande curvatura de Berry, gerando vários pontos de Weyl, além de possuir uma frustração

geométrica que leva a um ferromagnetismo fraco [23]. Em sistemas com elétrons correlacionados, como neste caso, pode ser complicado observar diretamente os pontos de Weyl, de forma que se torna essencial o estudo de propriedades macroscópicas e dos mecanismos que as geram, como o AHE, que depende da topologia [23]. Estudos em filmes finos de  $Mn_3Sn$  mostraram que o AHE é dependente da espessura da amostra [10]. Já em monocristais, o efeito é bastante sensível com aplicação tanto de pressão hidrostática [51] como de pressão uniaxial [19]. Neste último caso, as mudanças ocorreram apenas com deformação ao longo do plano  $ab$ .

$Mn_3Ge$ , que é um material similar com mesma estrutura, também apresenta propriedades parecidas, com grande AHE sensível a pressão hidrostática [11] e pressão uniaxial [30]. Por outro lado, estudos em  $Mn_3Pt$ , que possui estrutura cúbica ao invés de hexagonal e redes kagomés com momentos magnéticos com outra orientação, observaram AHE dependente de pressão uniaxial [69] e de tensão epitaxial [29], que não aparece em monocristais. Tendo isso em vista, existe a possibilidade de também haver uma transição estrutural associada a esses fenômenos, especialmente considerando que já foram propostas transições estruturais nesse grupo de materiais através de deformações [65]. Neste trabalho o  $Mn_3Sn$  foi investigado com o uso de pressão uniaxial considerando essa possível transição estrutural, através de medidas Hall e de difração de raios X em monocristal.

## 4.1 Síntese e caracterização de $Mn_3Sn$

Os cristais de  $Mn_3Sn$  foram crescidos pelo método de fluxo metálico, usando o Sn como autofluxo. Como ele nunca havia sido sintetizado pelo grupo (GPOMS), foi necessário estabelecer uma rota para a síntese. Baseando-se em [54], que também utilizou crescimento por fluxo metálico, o tratamento final foi o da Figura 4.2 com um resfriamento bastante lento até 900 °C, buscando cristais maiores e evitando outras fases cristalinas que se formam abaixo dessa temperatura. Provavelmente por haver pouco fluxo (estequiometria muito próxima da fase desejada) não foi possível separar os cristais do fluxo com a centrífuga e, por isso, optou-se por fazer uma separação mecânica dos cristais visíveis, através de corte, Figura 4.3(a). A escolha dessa estequiometria foi para evitar as outras fases concorrentes que, pelo diagrama de fases binário de Mn e Sn, se formam abaixo de 890 °C e, para se obter  $Mn_3Sn$  numa temperatura maior que essa, é preciso estar próximo da estequiometria da própria fase.

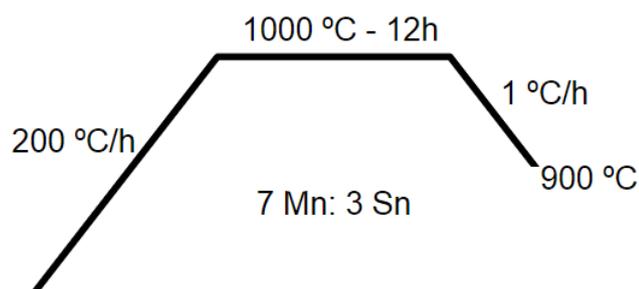


Figura 4.2: Tratamento térmico para obtenção de  $Mn_3Sn$ .

Com o intuito de confirmar a fase cristalina formada, foi feita difração de pó de raios X dos monocristais cortados. O resultado, na Figura 4.3(b), apontou formação de  $Mn_3Sn$ , mas havia também pequenos picos de outra fase, indicando uma pequena contaminação vinda do fluxo. Para identificar a contaminação também foi feita difração de pó de raios X no fluxo, mostrada na figura 4.3(c), indicando forte presença de  $Mn_2Sn$  e uma menor presença de  $MnSn_2$ . Para evitar essas fases indesejadas, a amostra foi polida em quatro lados, ficando sem contaminação visível.

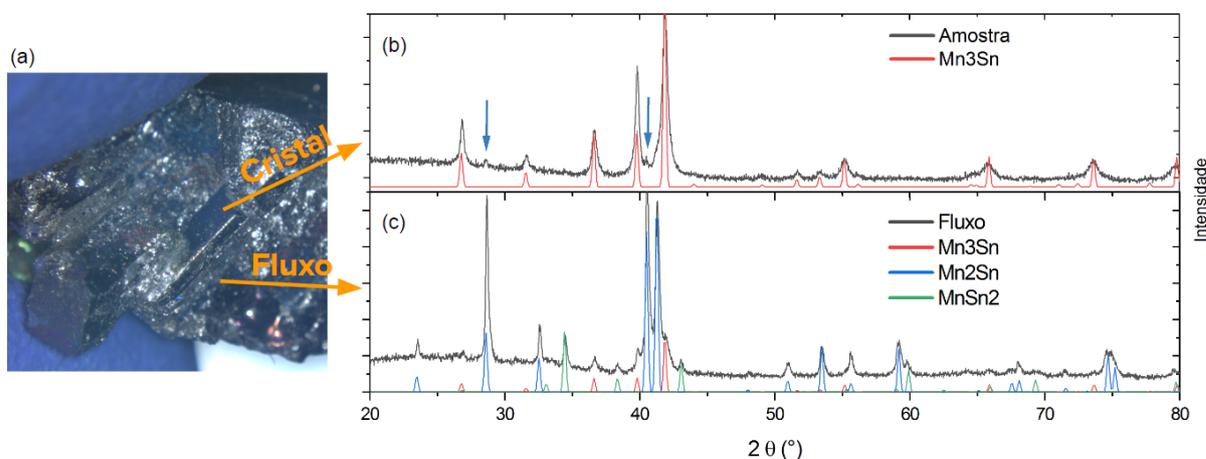


Figura 4.3: Identificação das fases após crescimento de  $Mn_3Sn$ . (a) Cristais visíveis misturados com fluxo após tratamento térmico. (b) Difratoemia de pó de raios X da amostra sintetizada. As setas indicam pequenos picos que não pertencem ao  $Mn_3Sn$ . (c) Difratoemia de pó de raios X do fluxo da amostra sintetizada.

Olhando o caráter magnético da amostra polida, foi feita medida de susceptibilidade magnética, onde esperava-se um sinal magnético maior para a fase antiferromagnética e uma diminuição desse sinal com a perda do ordenamento nas fases magnéticas de temperaturas menores, aparecendo indicativos nas transições magnéticas. Pela Figura 4.4(a) é possível identificar algumas transições, principalmente a de 275 K, mas, com a diminuição da temperatura, há

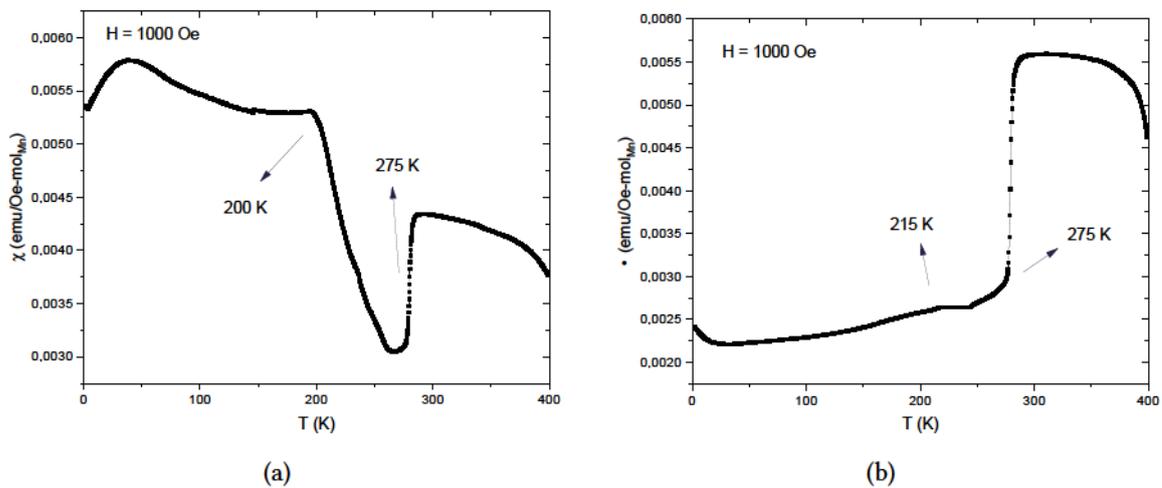


Figura 4.4: Susceptibilidade magnética de  $Mn_3Sn$  (a) antes e (b) depois de um polimento rigoroso.

um grande aumento da magnetização, o que não é característico do  $Mn_3Sn$ . Ao que parece, o sinal é do  $Mn_2Sn$ , que apareceu como principal contaminante na DRX e que tem alinhamento ferromagnético com sinal em baixas temperaturas bastante alto quando comparada ao  $Mn_3Sn$  [14]. Percebe-se, então, que a contaminação, mesmo sendo pouca pelo difratograma e quase imperceptível visualmente, ainda afeta bastante a magnetização. Somente após uma eliminação rigorosa do fluxo é que obteve-se o sinal magnético esperado de  $Mn_3Sn$ , Figura 4.4(b), garantindo que a amostra era pura. Nele é possível observar as demarcações das transições de 275 K, 200 K e abaixo de 50 K, em acordo com outros estudos [54].

Estando a amostra pura, foram feitas medidas de transporte elétrico em função da temperatura e em função do campo magnético para diferentes temperaturas. Na figura 4.5(a) é possível observar, em 275 K, a mudança do ordenamento antiferromagnético triangular para espiral, indicado pelo pequeno salto na medida. Já na figura 4.5(b) há um comportamento aproximadamente linear da resistividade Hall, exceto quando está na fase antiferromagnética triangular, onde aparece efeito Hall anômalo (AHE). Nesse material há a peculiaridade de que o AHE apresenta uma histerese gerada pela diferença de caminhos tomados na medida. A largura dessa histerese gira em torno de 0,04 T e a amplitude em que a medida satura é cerca de  $\rho = 26 \mu\Omega\text{cm}$ . O enfoque do estudo é o caráter topológico do material, sendo assim, será observado o comportamento desse AHE à temperatura ambiente em função da pressão uniaxial.

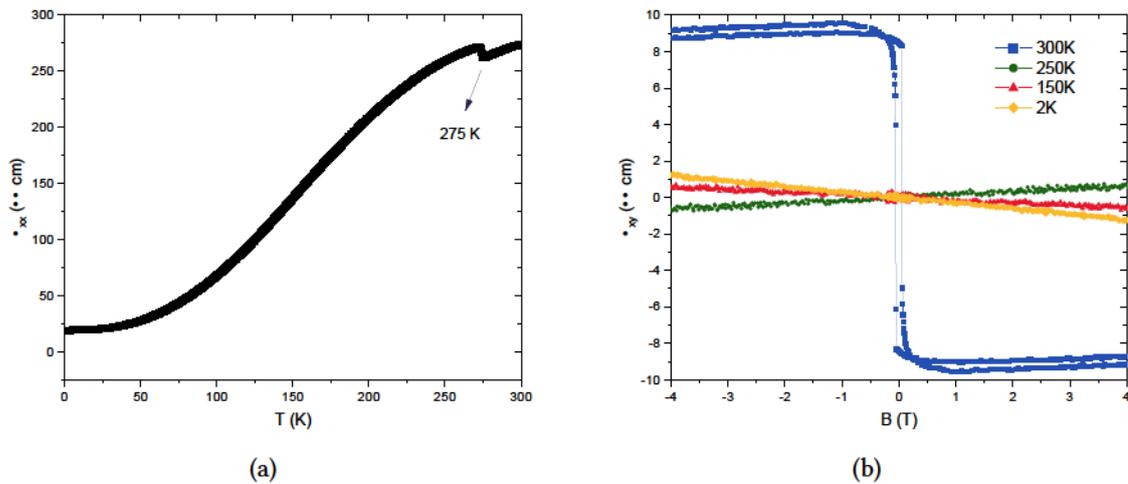


Figura 4.5: Transporte elétrico em  $\text{Mn}_3\text{Sn}$ . a) Resistividade longitudinal em função da temperatura. b) Resistividade Hall em função do campo magnético em diferentes temperaturas.

## 4.2 Pressão uniaxial

### 4.2.1 Efeito Hall em $\text{Mn}_3\text{Sn}$

A investigação do efeito Hall em  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  foi feita com a pressão uniaxial em duas direções diferentes, sendo uma delas ao longo do plano  $ab$  e a outra ao longo do eixo  $c$ . Observe na Figura 4.6 que, quando a pressão é aplicada ao longo do eixo  $c$ , o efeito Hall anômalo varia pouquíssimo, independente de quando a amostra é tensionada ou comprimida. Ao que parece, variar o parâmetro  $c$  na ordem de 0,1% não altera condições fundamentais para o surgimento

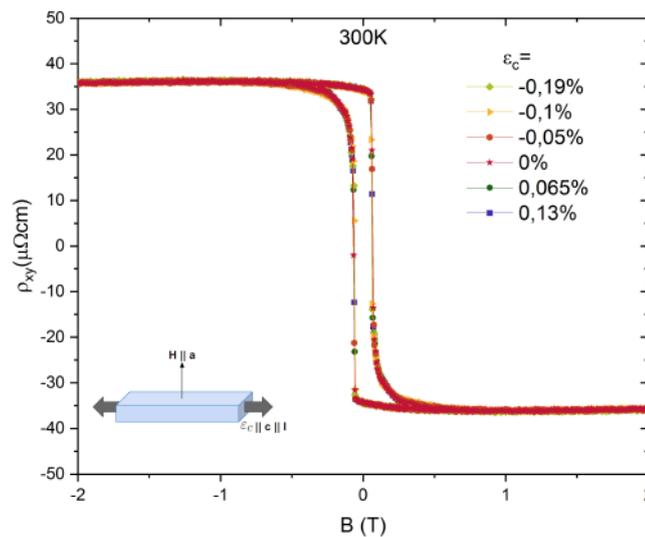


Figura 4.6: Resistividade Hall sob pressão uniaxial ao longo do eixo  $c$ .

do efeito Hall anômalo. No entanto, as medidas com pressão ao longo do plano  $ab$  mostraram um comportamento bem diferente.

A Figura 4.7 mostra o comportamento do AHE de acordo com a pressão uniaxial aplicada no plano  $ab$ . Durante a tensão, é possível observar um aumento da amplitude do efeito Hall anômalo, chegando a um aumento da ordem de 40% para uma deformação de 0,17%. Já na compressão essa amplitude diminui até se aproximar de zero a uma deformação de -0,09% e, com o aumento da compressão, há uma inversão desse sinal, se estabilizando em um limiar.

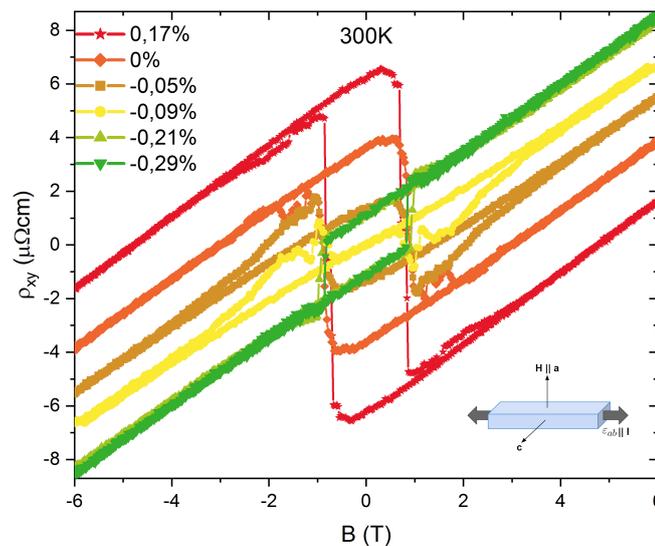


Figura 4.7: Resistividade Hall sob pressão uniaxial ao longo do plano  $ab$ .

Além do caráter anômalo, essa medida mostrou características diferentes das que apareceram anteriormente, por exemplo, a histerese nesse caso é cerca de 20 vezes maior que as outras medidas e há uma grande inclinação no sinal onde antes ficava quase horizontal, independente do campo. Além disso, há picos e oscilações que aparecem próximos dessa histerese que também não apareciam. Como a amostra se mostrou anteriormente pura, a explicação para essas diferenças pode vir da montagem específica e disposições dos contatos, de forma que a medida destacou algum defeito local, onde havia uma maior coercividade do material, por exemplo. Coercividade nesse tipo de material pode ser associado à formação de domínios antiferromagnéticos, devido a sua configuração de momentos magnéticos. Em condições normais a presença do ferromagnetismo fraco no plano  $ab$  garante que a aplicação de um campo magnético fraco seja suficiente para impedir a formação desses domínios magnéticos [11]. É provável que defeitos locais fizeram com que o ferromagnetismo gerado no plano diminuisse, de forma que campos magnéticos maiores passaram a ser necessários para suprimir os domínios antiferromagnéticos.

Nesse mesmo contexto, a presença de paredes de domínio grossas é capaz de gerar o efeito Hall topológico (THE) [26], que pode aparecer como contribuição para o AHE principalmente nos limites da histerese. Esse efeito pode ser a explicação para os picos que apareceram próximos dos limites da histerese, região na qual há um regime com múltiplos domínios [25, 26]. THE em  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  já foi observado em vários outros estudos [63, 47, 9], o que torna essa explicação coerente.

A dependência do AHE com as direções de deformação fortalece a ideia de que sua origem se dá no antiferrimagnetismo triangular. Como os momentos magnéticos estão dispostos no plano  $ab$ , uma pressão uniaxial ao longo do plano altera esse alinhamento, mudando o vetor ferromagnético resultante e, possivelmente, também desviando momentos para fora do plano, como já observado para pressão hidrostática em  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  [52], que possui mesma estrutura que o  $\text{Mn}_3\text{Sn}$ . Nesse caso, mudanças no AHE foram associadas apenas ao vetor magnético resultante fora do plano [11]. Por outro lado, pressão uniaxial perpendicular ao plano  $ab$  poderia, a princípio, não alterar os alinhamentos dos *spins*, apenas alterando as distâncias interplanares. Sendo assim, ao considerar a estrutura triangular como a origem do AHE, o mecanismo intrínseco desse efeito permanece intacto durante as deformações, concordando, assim, com os resultados da Figura 4.6.

#### 4.2.2 Difração de raios X em monocristal de $\text{Mn}_3\text{Sn}$

Motivado por uma possível transição estrutural entre as fases hexagonal, cúbica e tetragonal do  $\text{Mn}_3\text{Sn}$ , sugerida em estudo teórico [65], foi feito um estudo de difração de raios X desse cristal com tensão uniaxial ao longo do eixo  $c$ . Esse estudo indicou que deformações em determinadas direções do cristal poderiam gerar mudanças na sua estrutura. No caso, a estrutura hexagonal poderia se transformar em tetragonal, que poderia ser observado através de grandes mudanças nos picos de difração medidos na DRX.

Os picos escolhidos para as medidas foram das direções  $(0\ 0\ 10)$ ,  $(8\ 0\ 0)$  e  $(4\ 4\ 0)$ , mostradas na Figura 4.8, priorizando direções puras e não paralelas, facilitando a reconstrução dos parâmetros de rede posteriormente. A Figura 4.9 mostra o comportamento dos picos de difração para várias tensões aplicadas. Na direção  $(0\ 0\ 10)$ , alinhada com a tensão, o ângulo de difração diminui conforme a tensão é aplicada, indicando um aumento no parâmetro  $c$  da célula unitária. Por outro lado, os outros picos não se movimentam tanto, o que significa que há pouca modificação no plano  $ab$ . Observe também que, a partir de certo ponto, o pico em  $(0\ 0\ 10)$

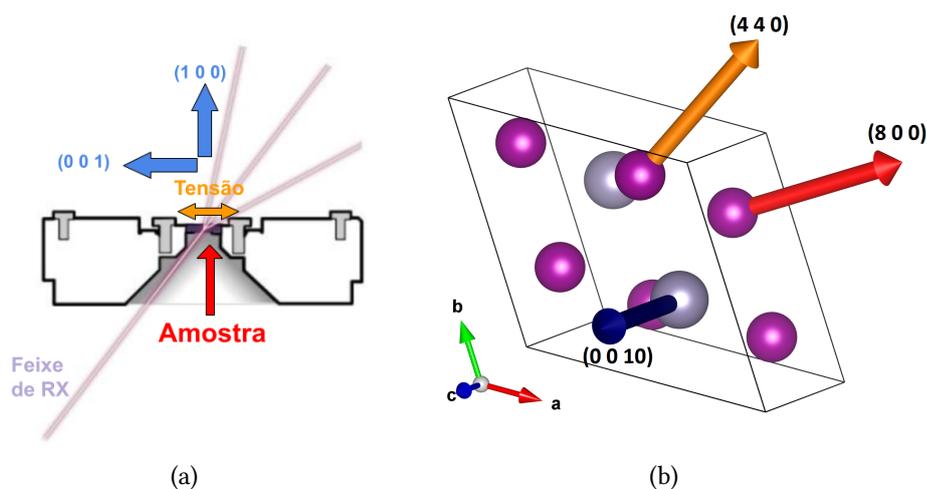


Figura 4.8: (a) Esquema da montagem e orientação do  $Mn_3Sn$  para o experimento de DRX em monocristais. Adaptado de [46]. (b) Célula unitária do  $Mn_3Sn$  com as direções medidas no experimento de DRX em monocristais.

começa a alargar e a perder intensidade, até o cristal quebrar. Esse alargamento, mostrado na Figura 4.10, indica que a condição de Bragg para difração está diminuindo, ou seja, a tensão uniaxial está deformando os planos de difração. Caso a amostra não quebrasse, é possível que isso também fosse um início de transição estrutural, com o sumiço desse pico.

A partir das posições dos picos de difração analisados, foram calculados os parâmetros de rede em função da tensão aplicada, na Figura 4.11. Para isso foi considerado que a estrutura hexagonal é conservada, o que é razoável tendo em vista que a tensão está puramente no eixo  $c$  e perpendicular aos outros eixos. Nesse caso, os parâmetros  $a$  e  $b$  serão iguais. Assim, observa-se um aumento no parâmetro  $c$ , chegando a uma variação de 0,09%, enquanto há uma diminuição do parâmetro  $a$  com menor proporção, variando cerca de -0,009%. É interessante notar que a variação do parâmetro de rede não coincide com a porcentagem de deslocamento medida pela célula, ou seja, essa não é a deformação real do material. Isso mostra que parte da deformação vem de outras fontes, como por exemplo a Stycast usada para prender a amostra, que provavelmente deforma consideravelmente. Outra possibilidade é o desalinhamento na montagem, que pode diminuir ainda mais a deformação real no eixo principal. Ainda assim, o comportamento como um todo remete a um padrão linear, de forma que é coerente fazer análises em função da deformação de todo o conjunto. Se o objetivo é fazer uma análise com a deformação real, pode ser interessante buscar estratégias e montagens que eliminam boa parte das outras contribuições envolvidas, como feito em [19].

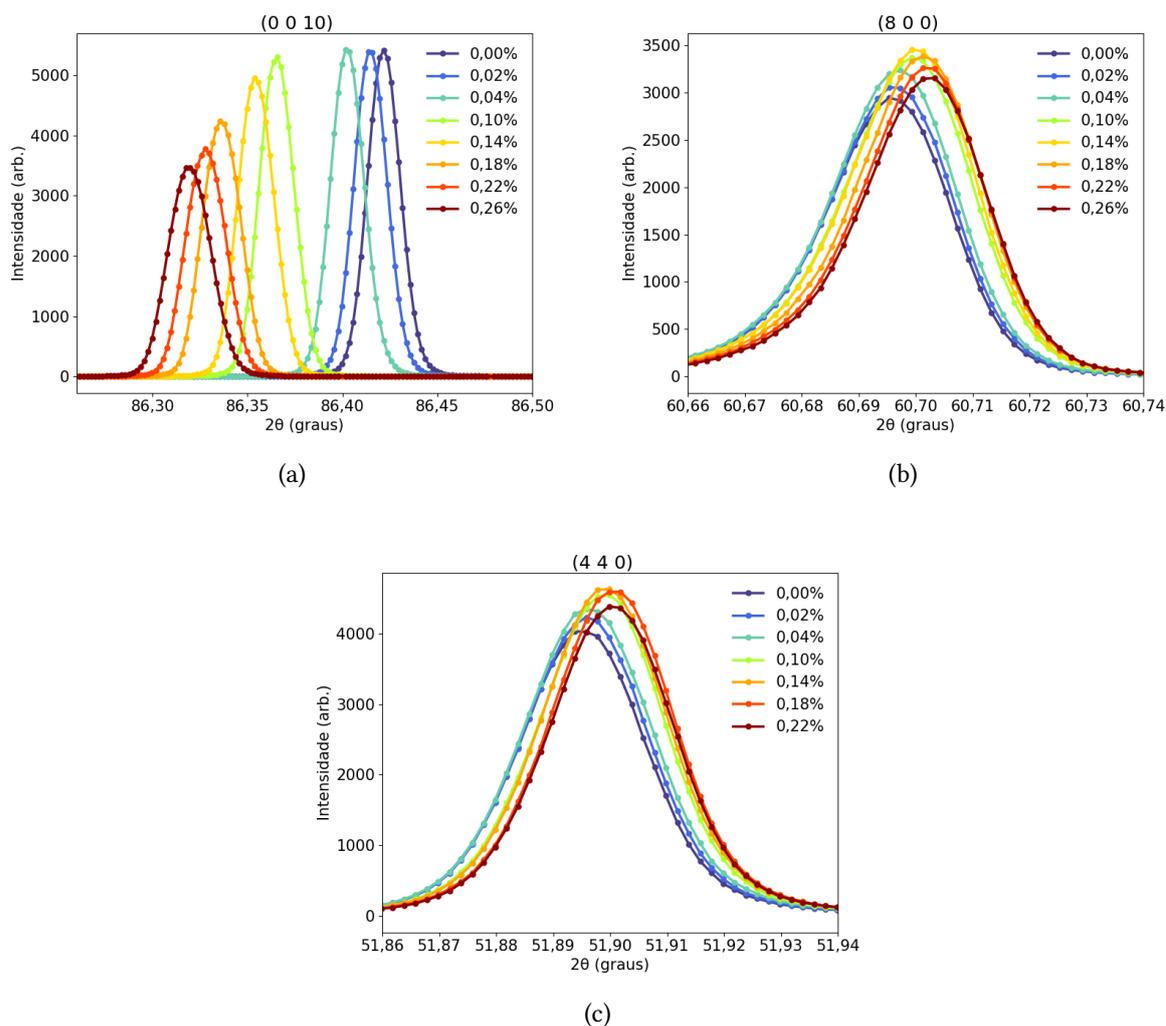


Figura 4.9: Difração de raios X de Mn<sub>3</sub>Sn em função dos ângulos de difração para diferentes tensões uniaxiais, nas direções (a) (0 0 10), (b) (8 0 0) e (c) (4 4 0).

Apesar de toda a movimentação e alargamento dos picos, não foi observada nenhuma transição estrutural nesse material. Comparando esse comportamento estrutural com o elétrico observado anteriormente, encontra-se uma coerência, de forma que não apareceu nenhuma mudança significativa em ambos os casos. Ao que tudo indica, a amostra é pouco sensível a mudanças no parâmetro  $c$  e as mudanças no plano  $ab$ , nesse caso, são pequenas demais para afetar as medidas elétricas. Não há, então, dependência entre o AHE e as distâncias interplanares dos planos  $ab$ , de forma que a sua origem se dá apenas pela própria estrutura desses planos, especialmente pela disposição dos momentos magnéticos. Por isso, a pressão uniaxial ao longo do plano  $ab$  gerou tantas mudanças no AHE. Por completeza, pode ser interessante reproduzir a medida de DRX com deformação ao longo do plano  $ab$  para também verificar alguma possível mudança estrutural envolvida.

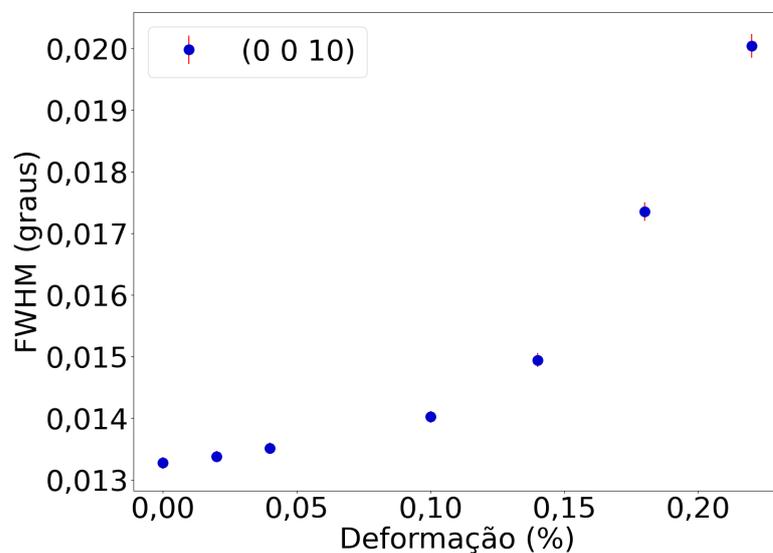


Figura 4.10: Largura a meia altura (FWHM) dos picos observados na direção (0 0 10) em função da deformação.

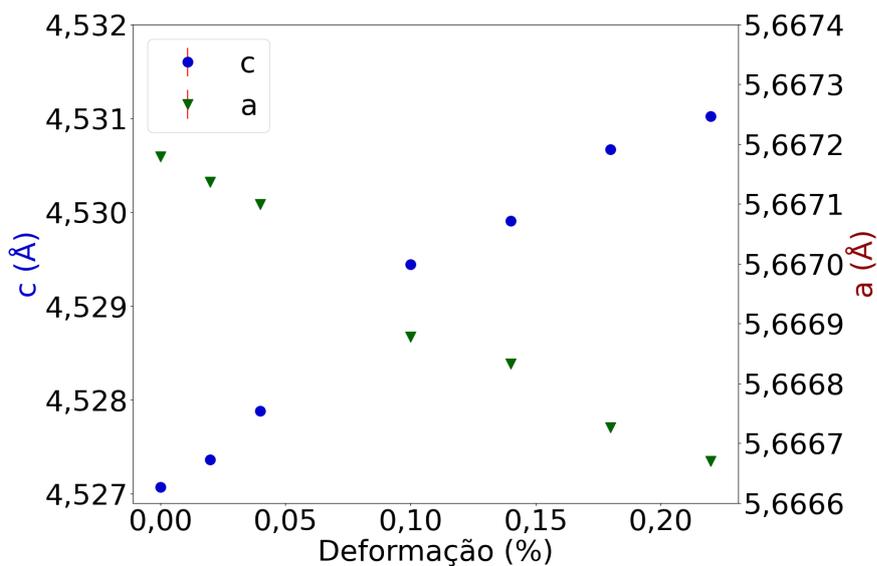


Figura 4.11: Parâmetros de rede do  $Mn_3Sn$  para diferentes tensões uniaxiais calculados a partir da difração de raios X, considerando que a estrutura permanece hexagonal.

## Capítulo 5

### GdPtBi

GdPtBi é uma liga do tipo *half-Heusler* que possui estrutura cúbica do grupo espacial  $F-43m$ , que consiste em redes cúbicas de face centradas interpenetrada de cada elemento [55]. Abaixo de 9 K apresenta um ordenamento antiferromagnético, no qual os momentos do Gd são ordenados ferromagneticamente em planos (1 1 1), que, em contrapartida, são empilhados antiferromagneticamente ao longo da direção (1 1 1) [55, 21]. Na Figura 5.1 estão esquematizados a estrutura e o ordenamento magnético.

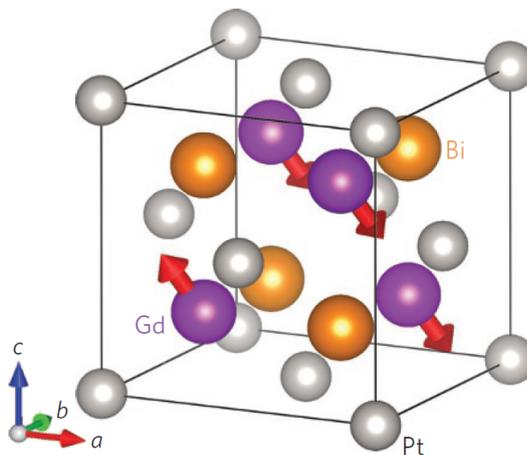


Figura 5.1: Estruturas cristalina e magnética do GdPtBi. Retirado de [55].

A estrutura eletrônica do GdPtBi, Figura 5.2, é disposta por bandas de condução e de valência, duplamente degeneradas, tocando-se em apenas um ponto, caracterizando-se como um semimetal. Na presença de um campo magnético a degenerescência dessas bandas é quebrada, de forma que é previsto um cruzamento das bandas e, juntamente com um acoplamento *spin-órbita*, formam-se cones de Weyl [50, 49]. Essa fase semimetálica de Weyl é caracterizada por apresentar certas propriedades como efeito Hall anômalo, efeito Hall planar, magnetorresis-

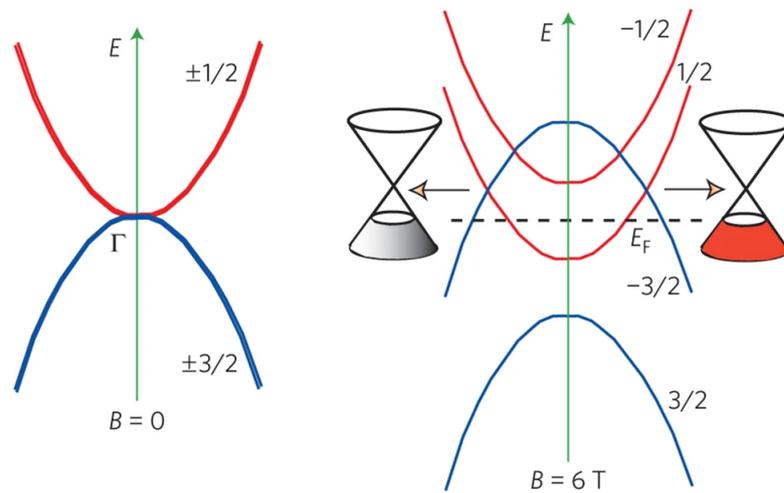


Figura 5.2: Estrutura de bandas do GdPtBi. À esquerda, sem campo magnético externo, há uma degenerescência nas bandas em torno de  $\Gamma$ . À direita, na presença de um campo magnético finito, a degenerescência é quebrada, levando à formação de cones de Weyl. Retirado de [18].

tência negativa, entre outras [22, 49, 55]. Além disso, também apresenta oscilações quânticas que indicam presença de cones de Weyl próximos da superfície de Fermi (FS) [66]. Todos esses efeitos aparecem em baixas temperaturas, mas alguns estudos indicaram que não há correlação entre a fase magnética e a fase topológica, sendo esta presente mesmo quando aquela está ausente [18].

Apesar da formação de cones de Weyl ter sido prevista teoricamente em GdPtBi, eles ainda não foram observados diretamente. Por isso, efeitos que dão informações sobre a topologia do material são ainda mais relevantes nesse caso. Estudos com pressão hidrostática mostraram que modificações na estrutura do material foram capazes de alterar a topologia do GdPtBi, reduzindo a anomalia do efeito Hall [53] e deixando a MR mais positiva, chegando a ponto de eliminar completamente a anomalia quiral [67]. É possível que deformações uniaxiais também sejam capazes de modificar algumas dessas propriedades.

Neste trabalho foi investigada a evolução das propriedades eletrônicas do GdPtBi quando sujeito a pressão uniaxial, através de medidas de magnetorresistência (MR) e efeito Hall. Analisando as oscilações quânticas da MR, foram obtidas informações diretamente da superfície de Fermi do material. Por fim, foi feito um estudo estrutural com pressão uniaxial através de medidas de difração de raios X.

## 5.1 Síntese e caracterização de GdPtBi

As amostras de GdPtBi foram crescidas pelo método de fluxo metálico, com excesso de Bismuto (autofluxo), seguindo o tratamento térmico e a estequiometria indicados na Figura 5.3(a). O cristal obtido por este crescimento está mostrado na figura 5.3(b) e, por ela, é possível notar, a partir dos planos triangulares e ângulos não retos, que os cristais provavelmente cresceram na direção (1 1 1). Isso dificultou a orientação precisa e arbitrária dos cristais, especialmente para deixar no formato da Figura 3.8, mas as faces originais foram mantidas, possibilitando alinhá-los com relação ao campo magnético e mantendo uma melhor simetria. Posteriormente, uma nova fornada foi preparada e, durante um estágio no MPI CPFS, em Dresden, Alemanha, as novas amostras puderam ser devidamente orientadas na direção (1 0 0), com o auxílio de um difratômetro Laue, para experimentos com pressão uniaxial.

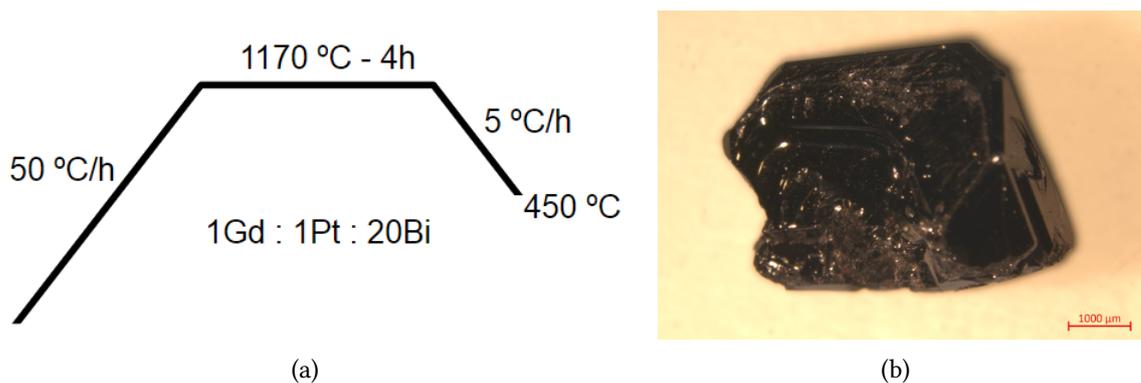


Figura 5.3: (a) Tratamento térmico e estequiometria para obtenção de GdPtBi. (b) Cristais de GdPtBi obtidos após crescimento.

Para identificar a fase cristalina obtida e garantir que não havia outras fases misturadas, foi realizado experimento de difração de raios X em pó. Através de um refinamento Rietveld, Figura 5.4(a), realizado a partir da referência [12], foi identificada a fase desejada de GdPtBi com parâmetro de rede  $a = 6,68 \text{ \AA}$  sem fases concorrentes, exceto um pouco de Bi, resíduo do fluxo. Também foram feitas medidas de magnetização e de resistividade para caracterizar a amostra. A magnetização, na Figura 5.4(b), indicou uma temperatura de Néel  $T_N = 8,9 \text{ K}$ , coincidindo com a de outros estudos [49]. A curva de resistividade, Figura 5.4(c), também resultou na mesma  $T_N = 8,9 \text{ K}$ , tendo mesmo formato e resistividades de mesma ordem que a literatura ( $\rho_{2K} \approx 3,5 \text{ m}\Omega\text{cm}$ ) [18].

Olhando para o caráter topológico sem uso de pressão uniaxial, foram feitas medidas de transporte elétrico com aplicação de campo magnético, observando o efeito Hall e a magne-

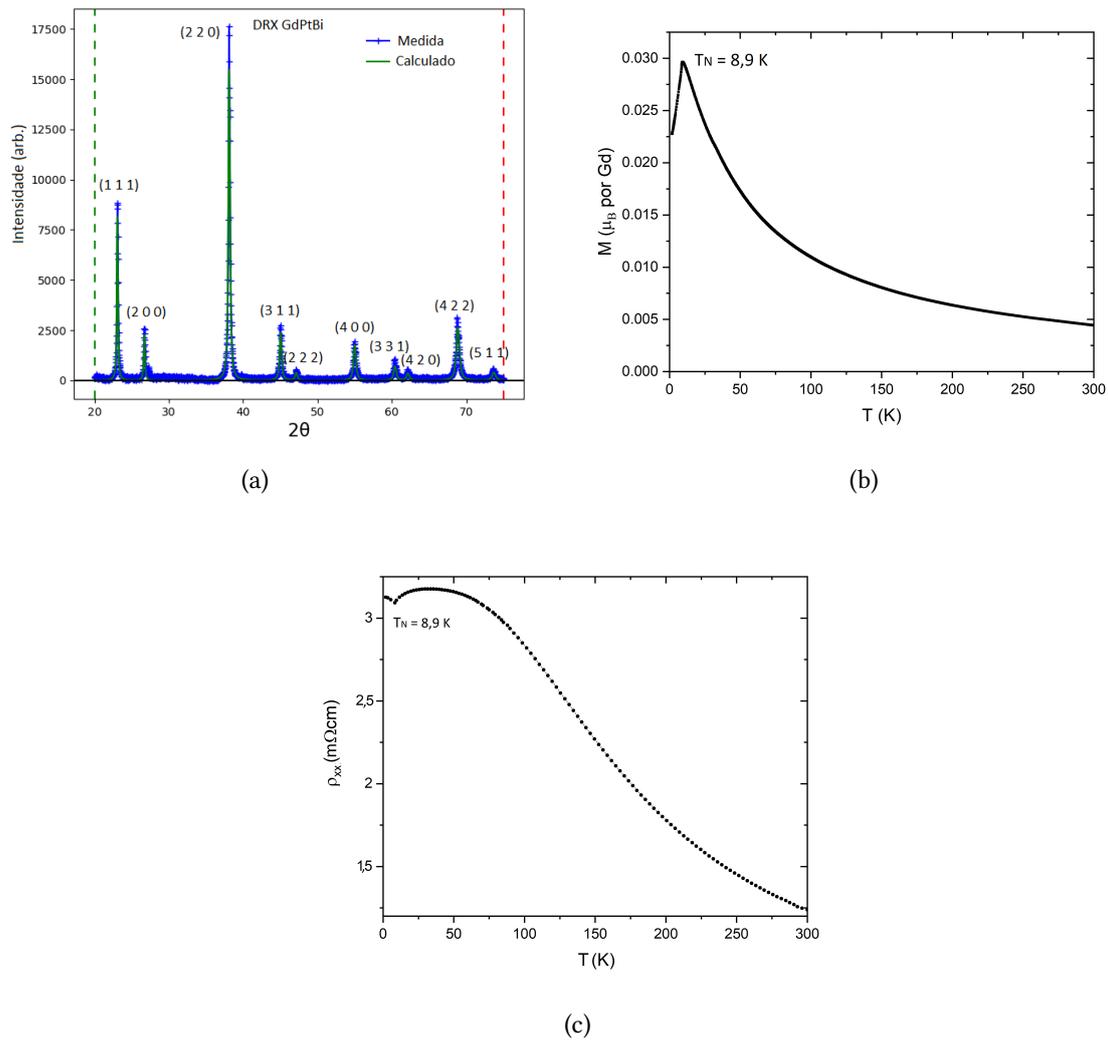


Figura 5.4: (a) Refinamento do difratograma de raios X em pó do GdPtBi. (b) Momento magnético em função da temperatura do GdPtBi. (c) Resistividade em função da temperatura do GdPtBi.

torresistência em diferentes temperaturas. Pelo efeito Hall, Figura 5.5(a), é possível notar um comportamento não linear em torno de 5T para baixas temperaturas, que se origina do efeito Hall anômalo. Apesar de geralmente essa anomalia aparecer como um salto em torno de zero, como no caso do  $Mn_3Sn$ , no GdPtBi é esperado aparecer a partir de certo campo magnético porque ele apenas se torna um semimetal de Weyl após a aplicação do campo. Observa-se também que esse comportamento continua a aparecer mesmo com temperaturas acima da  $T_N$  mas, depois de um certo aquecimento, o efeito não é mais detectável, indicando que a fase topológica depende da temperatura mas não depende diretamente do ordenamento antiferromagnético. Comparando-se com [55], a não linearidade aparece na mesma faixa de campo

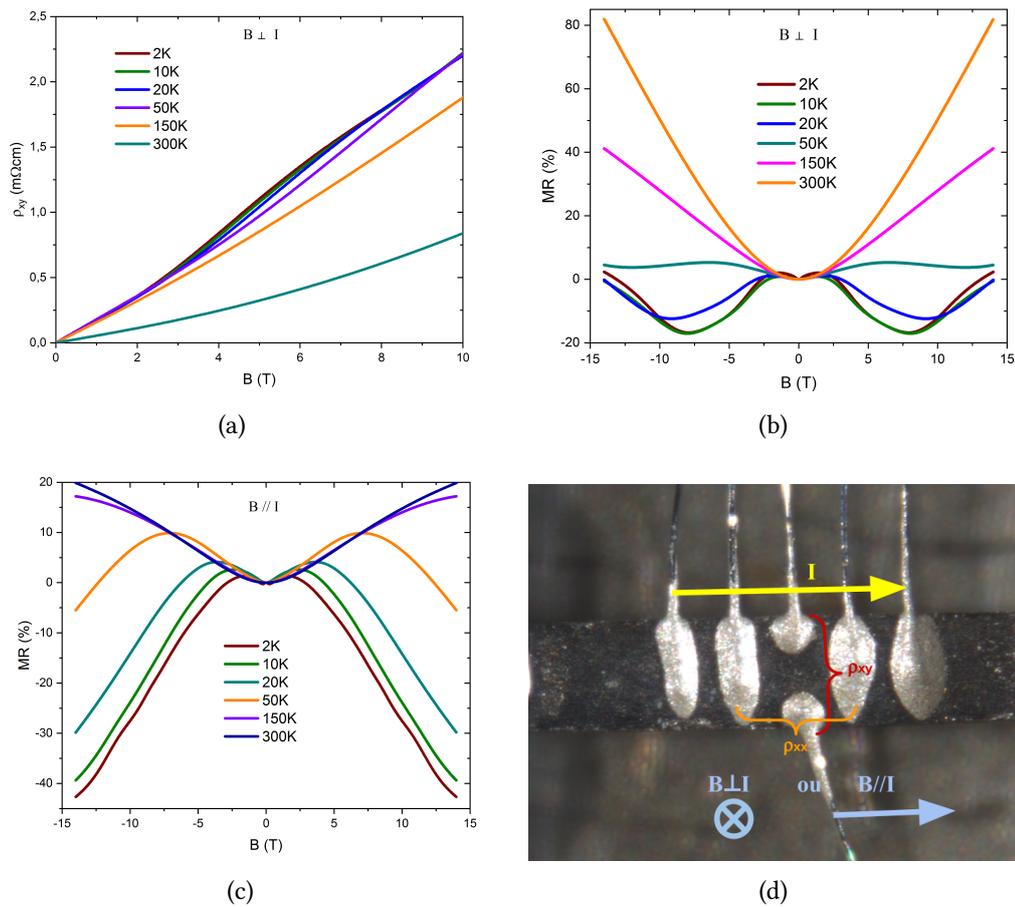


Figura 5.5: (a) Resistividade transversal em função do campo magnético e magnetorresistência longitudinal com o campo (b) perpendicular e (c) paralelo à corrente. (d) Esquema com contatos e direções.

magnético, mas com intensidade muito menor, indicando que o AHE provavelmente depende da orientação do cristal.

A magnetorresistência foi medida com o campo magnético tanto perpendicular como paralelo à corrente. O primeiro caso mostra uma MR negativa mas com uma componente positiva competindo e aparentemente dominando em campos mais altos. Isso evidencia que a negatividade da MR, apesar de fortemente presente, não está dominando o experimento. Na verdade, é surpreendente que a curva seja tão negativa, visto que a explicação para essa medida em semimetais de Weyl é devido à anomalia quiral para campo magnético paralelo ao campo elétrico [18]. Por outro lado, desalinhamentos na montagem experimental poderiam contribuir com essa negatividade. Comparando-se com a literatura, a MR obtida foi mais negativa e com dominância em campos mais altos que o usual [49]. Além dos desalinhamentos, é possível que o crescimento em particular esteja contribuindo para essas diferenças.

Olhando para a segunda montagem, observa-se um domínio da anomalia quiral na MR, sendo que a menor medida de resistividade aparece no maior módulo de campo medido, não dando nenhum sinal de que ela vai voltar a crescer. Quando comparada a outros estudos, a MR obtida possui um formato esperado mas, ao contrário do caso anterior, se mostrou menos negativa [18, 49]. Novamente, isso pode significar que essas diferenças surgiram devido ao crescimento diferente do cristal. Para as duas montagens, o estado topológico se mostrou mais forte a temperaturas baixas mas, aparentemente, independentes da  $T_N$ .

## 5.2 Pressão uniaxial

### 5.2.1 Temperatura de Néel e Efeito Hall em GdPtBi

Um estudo da  $T_N$  sob pressão uniaxial foi feito através de curvas de resistividade em função da temperatura, tanto para amostra do primeiro crescimento como para a do segundo. Como é possível observar na Figura 5.6(a),  $T_N = 8,9$  K para as diferentes deformações na amostra do primeiro crescimento. De forma parecida, na amostra do segundo crescimento, orientada na direção (1 0 0), a  $T_N$  também não mudou, se mantendo em  $T_N = 8,8$  K, Figura 5.6(b). Isso significa que a ordenação magnética provavelmente permanece a mesma, independente da pressão uniaxial ou da orientação do cristal. É possível que isso seja devido a uma estrutura magnética robusta, pouco sensível a deformações. Se comparada com a pressão hidrostática [53], onde foi necessário uma pressão maior que 2 GPa para variar 0,5 K na  $T_N$ , a pressão

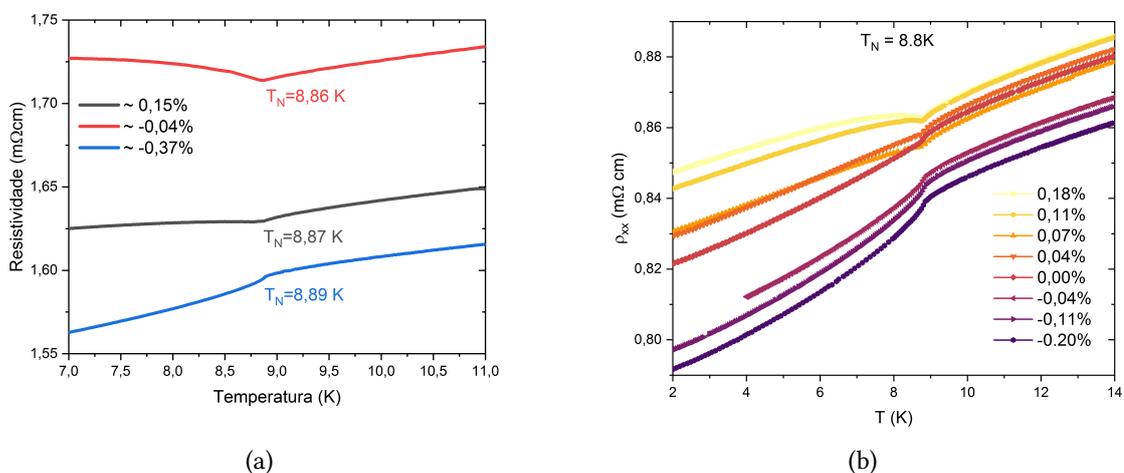


Figura 5.6: Resistividade em função da temperatura para algumas deformações, destacando a  $T_N$ , de GdPtBi a) sem orientação e b) orientado no eixo (1 0 0).

uniaxial utilizada aqui pode ser pequena demais para se observar mudança do tipo, atingindo valores menores que 0,4 GPa. Por outro lado, é possível notar padrões diferentes nas curvas de resistividade, especialmente abaixo da  $T_N$ .

Quando a amostra é tensionada, a curva abaixo da  $T_N$  parece ter uma concavidade voltada para baixo, enquanto ao comprimi-la a concavidade se inverte. Esses diferentes padrões já foram observados dependendo da amostra utilizada [18, 49] ou dependendo da pressão hidrostática aplicada [53], e pode estar associada a um comportamento mais isolante ou mais metálico, dependendo da distância entre o ponto em que as bandas se tocam e o nível de Fermi [49]. Nesse caso, isso seria um indicativo de que a compressão está afastando esse ponto da FS, enquanto a tensão está aproximando-o.

Também foram feitas medidas de resistividade Hall para algumas pressões em 2 K na amostra do primeiro crescimento, mostrado na Figura 5.7(a). Nesse caso, não havia acesso ao medidor de capacitância para se ter informações detalhadas sobre as deformações e, por isso, o comparativo foi feito com tensão elétrica aplicada na célula de pressão uniaxial. Nenhuma mudança considerável no efeito Hall foi observada e apenas foram obtidas curvas sobrepostas. Isso pode indicar que as mudanças geradas pela pressão uniaxial são pequenas demais para alterar o AHE, se mostrando bastante estável para esse grau de deformação. Na amostra do segundo crescimento, orientada em (1 0 0), optou-se por observar a condutividade Hall para várias deformações, Figura 5.7(b), de forma que a anomalia do efeito Hall fica mais evidente que na resistividade. Nesse caso foi possível observar que a curva como um todo se mantém pa-

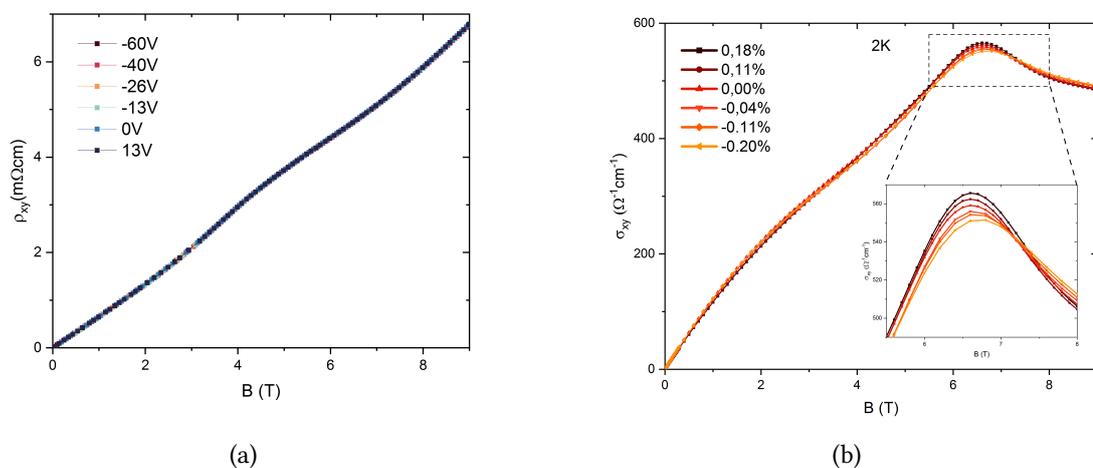


Figura 5.7: (a) Resistividade Hall em função da tensão elétrica aplicada no piezo, proporcional à pressão uniaxial, em GdPtBi não orientado. (b) Condutividade Hall em função da deformação em amostra de GdPtBi orientado no eixo (1 0 0).

recida, mas a anomalia varia um pouco, ficando menor com a compressão, enquanto aumenta com a tensão. Esse comportamento é condizente com a análise anterior quanto à distância entre a FS e o ponto que as bandas se tocam estar variando com a deformação, tendo em vista que quanto mais afastado os cones de Weyl estiverem, menores serão os efeitos topológicos, ou seja, menor será o efeito Hall anômalo.

### 5.2.2 Magnetorresistência em GdPtBi

Para estudar a evolução da estrutura eletrônica com pressão uniaxial foram feitas medidas de magnetorresistência na amostra do primeiro crescimento em 2 K, 7 K, 11 K e 50 K, variando-se o campo magnético de 0 T a 14 T paralelo à corrente. Observando-se o comportamento em 2 K, Figura 5.8, a primeira coisa a se notar é um aumento na MR ao se deformar a amostra, principalmente olhando para os altos campos. Esse aumento segue um padrão durante a compressão, indicando que quanto maior a compressão, menor a negatividade da MR. Ao que parece, à medida que a amostra vai sendo comprimida, a anomalia quiral vai enfraquecendo. No entanto, esse padrão não se mantém quando a amostra é tensionada.

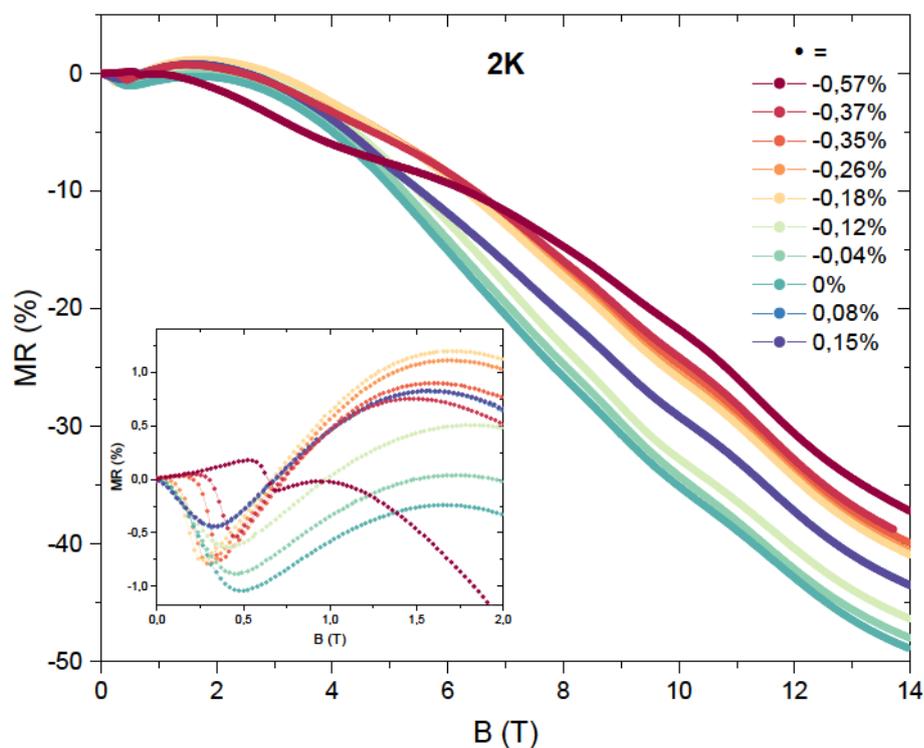


Figura 5.8: Curva de magnetorresistência para diferentes pressões uniaxiais em 2K. A figura inserida mostra as curvas ampliadas para baixos campos.

As curvas com deformação  $\epsilon = 0,08\%$  e  $\epsilon = 0,15\%$  são praticamente indistinguíveis, sendo a primeira com MR ligeiramente maior, mas ambas acima da curva de  $\epsilon = 0\%$ . Isso pode ser um indicativo de que GdPtBi sem deformação é otimizada para uma maior anomalia quiral e qualquer  $\epsilon \neq 0\%$ , independente do sentido, aumenta a MR, sendo que, no caso positivo, ela se estabiliza em um valor fixo. No entanto, um outro fator importante a ser considerado é a sequência das medidas. Como informado anteriormente, foi adotada uma sequência de medição começando pelas primeiras compressões para só depois tensionar. Existe a possibilidade de que a compressão tenha influenciado na medida de tensão, seja por causa de uma fratura ou por causa de uma deformação permanente. Esta última indicaria que o GdPtBi entrou em um regime de deformação plástica durante a compressão, não retornando às características iniciais após relaxar, o que não é surpreendente visto que não existem materiais perfeitamente elásticos [64].

Olhando com mais detalhes o comportamento em baixos campos, destacado na imagem ampliada da Figura 5.8, observa-se também mudanças notáveis com respeito à primeira queda na MR, mudando tanto a posição quanto a intensidade dessa queda. Novamente, as curvas de tensão não se encaixam num padrão evidente, mas olhando apenas para as compressões é possível notar que, a partir de uma certa compressão, a resistividade começa a cair em um valor de campo cada vez maior, mas a amplitude da queda se torna cada vez menor. Para tentar entender melhor o que está acontecendo, é importante identificar o que dá essa característica às curvas.

Como se trata de uma queda abrupta, esse efeito não parece estar ligado com a MR negativa em altos campos. Uma possível explicação é a presença de um efeito de localização fraca (WL), um fenômeno de interferência quântica entre elétrons em metais desordenados, que tem como principal característica uma queda abrupta na MR em baixos campos [31]. Dessa forma, é como se a compressão estivesse destruindo esse efeito em baixíssimos campos, mas voltando a aparecer com o aumento do campo. Como o efeito é maior para campos menores, é esperado que também haja uma diminuição na intensidade.

Apesar das várias semelhanças, WL não é muito esperado no GdPtBi porque férmions de Weyl são geralmente associados ao efeito oposto, a antilocalização fraca (WAL) [33]. Além disso, nenhum comportamento desse tipo foi observado em outros estudos com GdPtBi, pelo contrário, em [67] o comportamento em baixos campos foi associado ao WAL. Nesse ponto, pode ser que a amostra obtida neste estudo tenha alguma diferença em comparação aos outros

crescimentos. Por outro lado, é possível que o regime se dá em campos baixos demais para que haja cones de Weyl formados influenciando no efeito.

A Figura 5.9 mostra as curvas de MR para outras temperaturas. Conclusões parecidas podem ser tiradas a partir desses gráficos, apenas tendo em vista que, por serem temperaturas maiores, os efeitos observados serão menores. Algo que corrobora a ideia de a ordem das medidas influenciar é a medida em 20 K, na qual a curva com  $\epsilon = 0\%$  foi medida, excepcionalmente, somente depois das compressões e também resultou em algo fora do padrão observado. É interessante, também, reafirmar que não há indicativo de que a MR negativa tem alguma conexão com a fase antiferromagnética abaixo de 9 K, já que está presente em temperaturas bem maiores. Nota-se também que, no geral, o efeito em baixos campos deixa de aparecer com o aumento da temperatura, algo que também é característico da WL [32].

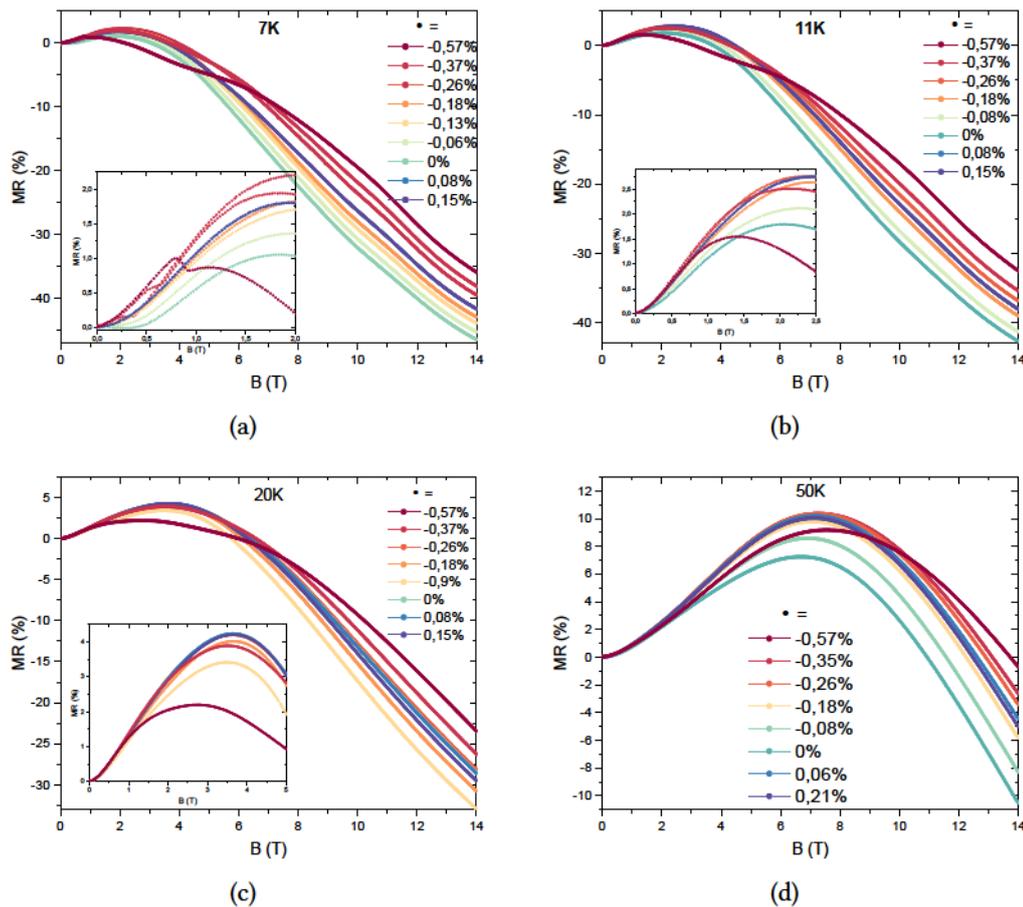


Figura 5.9: Curvas de magnetorresistência para diferentes pressões uniaxiais em (a) 7K, (b) 11K, (c) 20K e (d) 50K.

No estudo com a amostra do segundo crescimento, orientada no eixo (1 0 0), optou-se por realizar o experimento com campo magnético perpendicular à corrente, onde ainda aparece o caráter negativo da MR devido à anomalia quiral e, simultaneamente, foi possível medir

o efeito Hall, mostrado anteriormente. A Figura 5.10 mostra as curvas obtidas. Novamente há um padrão de aumento da MR junto com a compressão, mas dessa vez fica evidente que o comportamento continua durante a tensão. Ou seja, reforça a ideia de que havia algo de errado com as medidas de tensão da amostra anterior. Dessa forma, a anomalia quiral está enfraquecendo com a compressão e fortalecendo com a tensão. Isso pode estar de acordo com a análise feita na subseção 5.2.1 em que a compressão estaria afastando da FS o ponto em que as bandas eletrônicas se tocam, enquanto o inverso acontece durante a tensão, tendo em vista que a anomalia quiral gera MR mais negativa quando está próxima da FS.

Olhando para baixos campos, no gráfico inserido da Figura 5.10, o comportamento se dá um pouco diferente, mas mantém o padrão onde a queda inicial é favorecida na tensão e diminui na compressão. Naturalmente, como nessa configuração há uma contribuição muito mais positiva do que antes, esse efeito não se destaca tanto. Ainda assim, a diferença de comportamento observada indica que esse efeito pode depender da orientação.

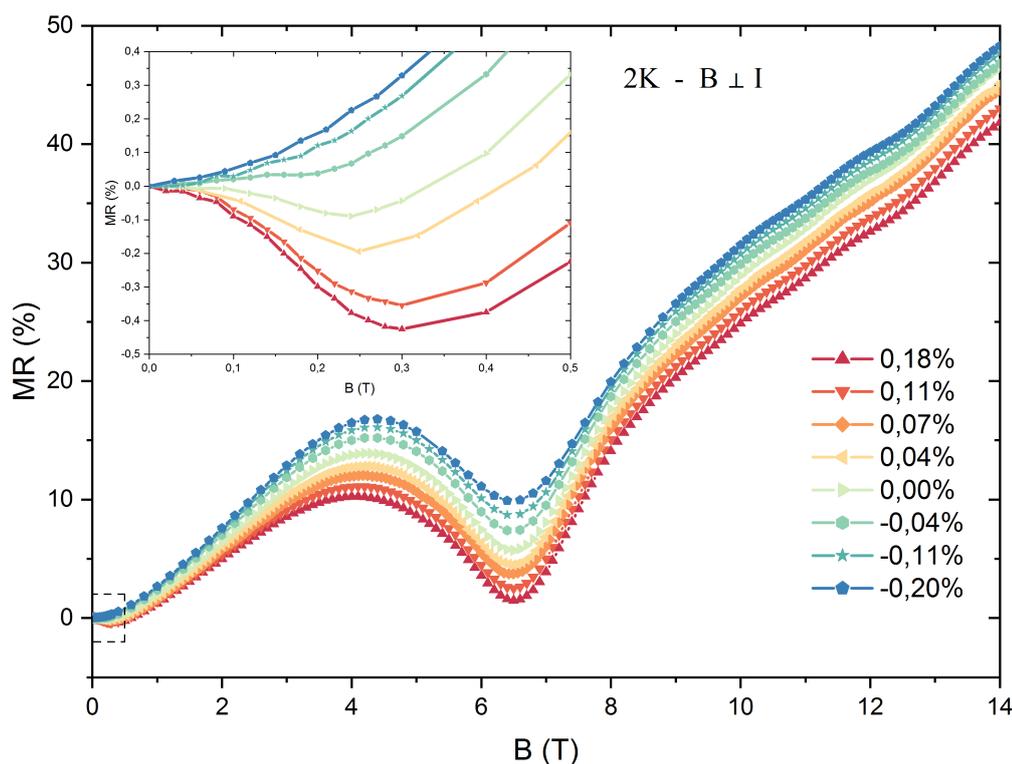


Figura 5.10: Curva de magnetorresistência para diferentes pressões uniaxiais em 2K na amostra orientada no eixo (1 0 0). A figura inserida mostra as curvas ampliadas para baixos campos.

### 5.2.3 Oscilações quânticas em GdPtBi

Para obter informações diretas da superfície de Fermi, foi feito um estudo em cima das oscilações quânticas que apareceram nas curvas de MR. Para isso, a segunda derivada das curvas de MR foi plotada em função do inverso do campo magnético ( $1/B$ ) na Figura 5.11(a). Observe que a amplitude das oscilações decresce à medida que a temperatura aumenta, até se tornar indetectável em 20 K, mas mantêm a mesma posição, o que evidencia realmente se tratar de oscilações quânticas e não apenas de ruídos.

Como a posição não depende da temperatura, é suficiente analisar a posição das oscilações em 2 K. Assim, foi feito um *fit* linear entre os níveis de Landau e  $1/B$ , obtido a partir dos máximos e mínimos das oscilações observadas, Figura 5.11(b). Foram atribuídos níveis de Landau inteiros aos mínimos e semi-inteiros aos máximos, de forma que a reta interceptasse o eixo  $y$  no valor mais próximo de zero. O coeficiente angular dessa reta é equivalente ao valor da frequência de oscilação, enquanto o valor do coeficiente linear dá informação sobre a fase de Berry  $\phi_B$ . Especificamente,  $b = 0,5 \pm \delta$  é indicativo de  $\phi_B = 0$  (topologia trivial), enquanto  $b = 0 \pm \delta$  é indicativo de  $\phi_B = \pi$  (estrutura de bandas com dispersão linear), com  $\delta$  variando de 0 a  $1/8$  [41]. No gráfico, foi obtido uma frequência  $F = 38,2T$  e  $b = 0,509$ , sugerindo uma topologia trivial.

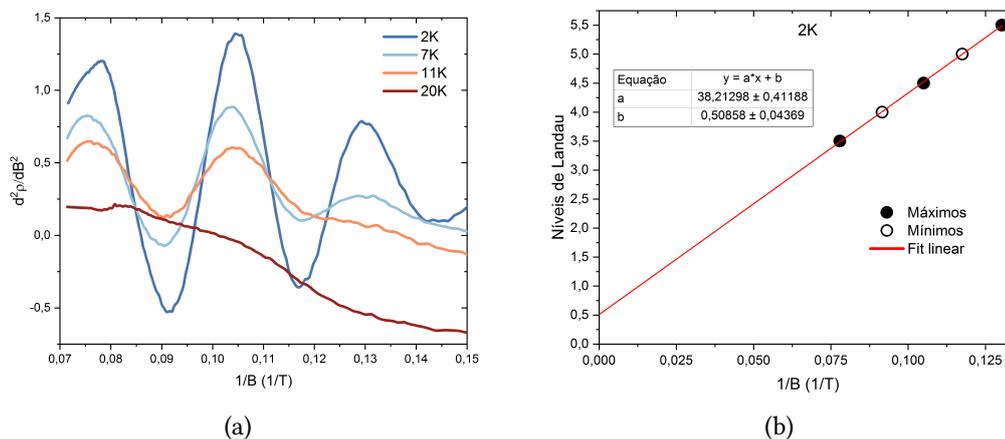


Figura 5.11: (a) Oscilações quânticas em GdPtBi sem deformação em diferentes temperaturas. (b) *Fit* linear entre os níveis de Landau e  $1/B$  a partir dos máximos e mínimos das oscilações em 2K.

Avaliando o comportamento dessa oscilação com a aplicação de pressão uniaxial, o mesmo procedimento foi realizado para as diferentes deformações. A Figura 5.12(a) mostra as oscilações observadas, onde há pequenas variações nas posições e amplitudes, mas claramente se tratando da mesma oscilação. Fazendo-se *fit* linear para cada deformação, na Figura 5.12(b), foi

possível obter o comportamento das frequências de oscilação, assim como o das intercepções das retas. Novamente, desconsiderando os pontos de tensão, é possível observar um padrão em função da compressão. Pela Figura 5.12(c), quanto mais a amostra é comprimida, maior tende a ser a frequência da oscilação, indicando um aumento da área da FS perpendicular a B, de acordo com a Equação 2.3. Esse aumento chega a ser próximo de 6,8% de área. De maneira parecida, na Figura 5.12(d), a compressão diminui o valor de intercepção, saindo de um valor próximo de 0,5 para valores menores, chegando a 0,16 na maior compressão alcançada. Ao que parece, a FS parte de uma topologia trivial e se torna não-trivial após a compressão, tendendo a uma fase de Berry  $\pi$ , ou seja, a um cone de Weyl ou de Dirac.

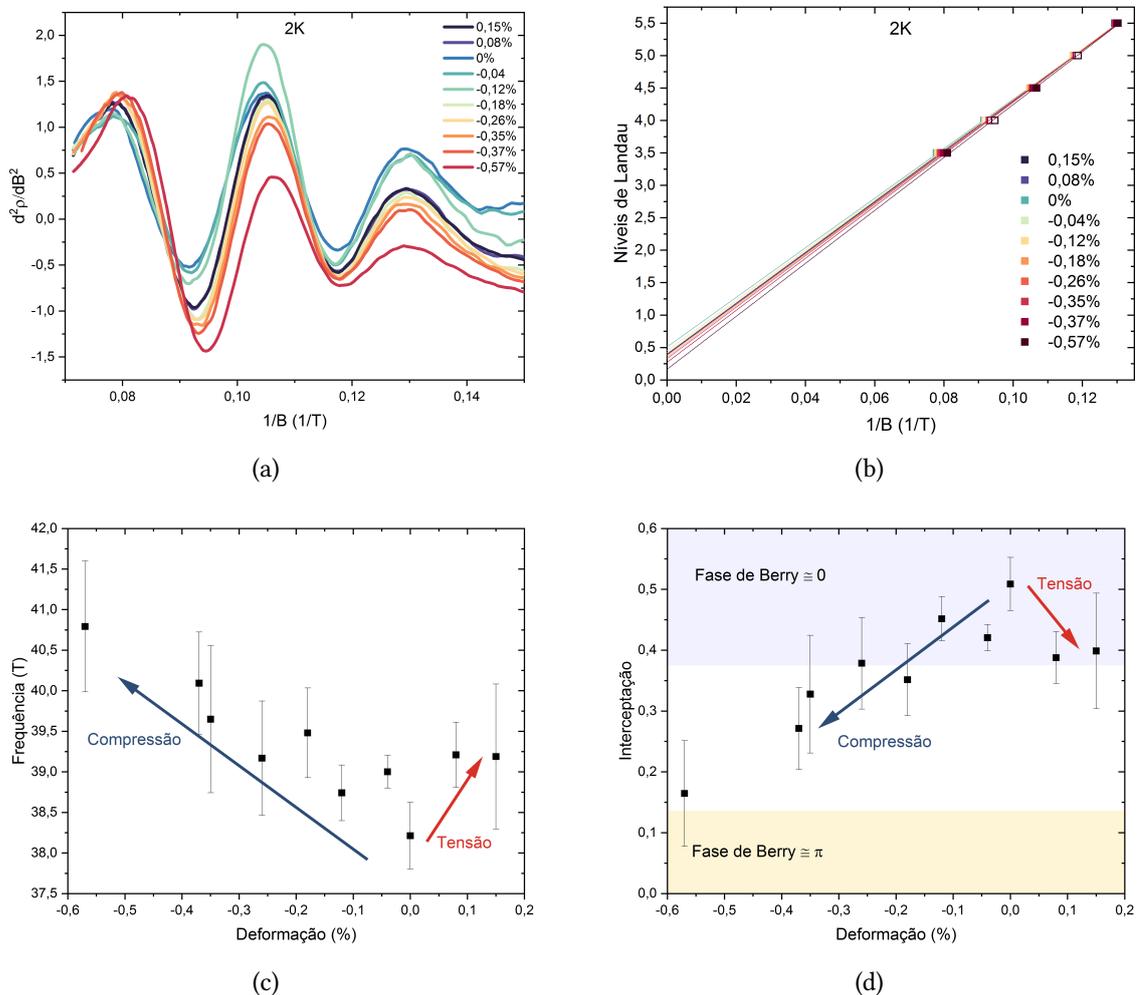


Figura 5.12: (a) Oscilações quânticas em 2 K para diferentes deformações, (b) *fit* linear entre os níveis de Landau e  $1/B$  a partir dos máximos e mínimos das oscilações em 2 K para diferentes deformações, (c) frequência da oscilação em função da deformação e (d) coeficiente linear em função da deformação. As faixas coloridas em (d) indicam as regiões em que a fase de Berry poderia ser 0 ou  $\pi$  considerando o valor de  $\delta$ .

Esse resultado é um pouco surpreendente, visto que na seção anterior foi mostrado evidência de um estado de topologia não-trivial, além de outras análises de oscilações quânticas sem pressão apontaram frequências menores e uma fase de Berry próxima de  $\pi$  [22, 66]. Por outro lado, [49] indicou que só foram encontradas oscilações de uma única frequência, quando deveriam aparecer duas diferentes no material. É possível que a oscilação quântica encontrada aqui seja de um pedaço da FS diferente, um que não tenha cones de Weyl e seja trivial, algo aceitável tendo em vista que elétrons de Weyl podem coexistir com elétrons triviais [61]. A variação na área desse pedaço da FS indica que a compressão provocou um movimento das bandas, fazendo com que os cones de Weyl se aproximassem e, assim, adquirindo fase de Berry.

Os mesmos procedimentos foram feitos com a MR da amostra orientada no eixo (1 0 0), obtendo-se a frequência e a interceptação variando com a deformação na Figura 5.13. Novamente há uma tendência de aumento de frequência com a compressão, mas dessa vez com uma diminuição durante a tensão inicial, seguido por um novo aumento pra tensões extremas. Esse padrão para compressões e pequenas tensões sugere algo parecido com o que foi proposto anteriormente, um afastamento do ponto onde as bandas se tocam com relação a FS aumenta a área da seção transversal, ou seja, aumenta a frequência. Nesse caso, a compressão estaria aumentando essa distância e, as pequenas tensões, diminuindo. Entretanto, o aumento da frequência nas tensões mais altas mostra que o comportamento se torna um pouco mais complexo que apenas aproximar e afastar. Também é interessante observar que o valor da

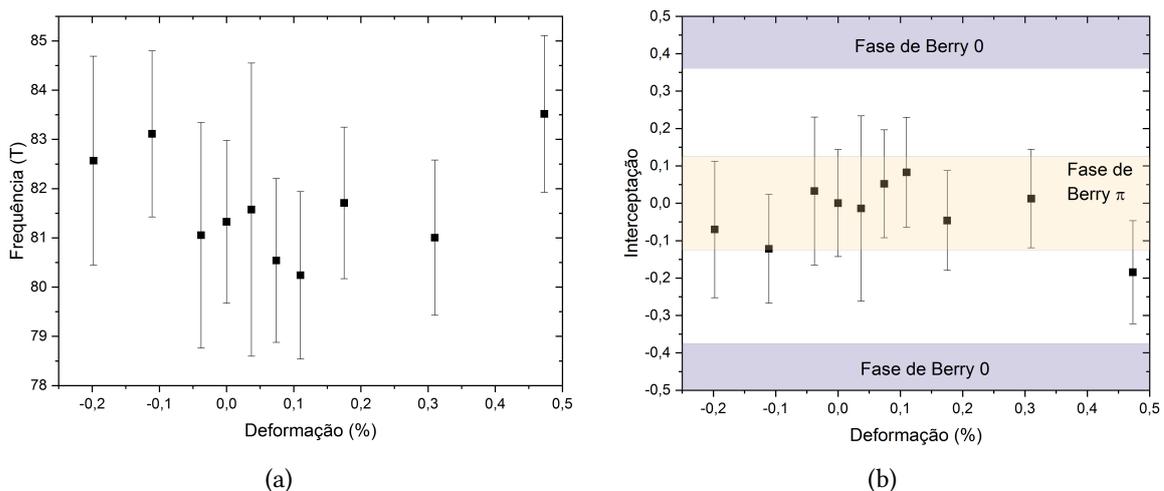


Figura 5.13: (a) Frequência das oscilações quânticas em função da deformação para GdPtBi orientado no eixo (1 0 0) e (b) ponto de interceptação do *fit* linear no eixo dos níveis de Landau em GdPtBi orientado no eixo (1 0 0). As faixas coloridas em (b) indicam as regiões em que a fase de Berry poderia ser 0 ou  $\pi$  considerando o valor de  $\delta$ .

frequência nesse caso é bem maior que antes, chegando a ser próximo do dobro, mas que a variação é proporcionalmente menor, tendo a maior parte das variações dentro da barra de erro. Essa diferença se deve principalmente às amostras serem de lotes de crescimento diferentes, que altera a posição das bandas em relação ao nível de Fermi [49].

Olhando para a interceptação observa-se a maior diferença. Desta vez em todos os pontos de deformação há indicativo de fase de Berry  $\pi$ , exceto pela tensão máxima, onde é preciso levar em conta a barra de erro. Isso mostra que no eixo (1 0 0) a seção transversal da FS está sempre dominado por elétrons não-triviais. Esses dados mostram a importância da orientação do cristal na análise de oscilações quânticas, tendo em vista que é possível obter resultados completamente diferentes dependendo da direção que está sendo estudada.

#### 5.2.4 Difração de raios X em monocristal de GdPtBi

Medidas de difração de raios X em monocristais foram feitas para investigar a estrutura do GdPtBi sob tensão uniaxial. Pela dificuldade de orientar os cristais antes do experimento, não foi possível alinhar a pressão uniaxial exatamente a um eixo arbitrário, mas a amostra foi preparada com o eixo (1 1 1) aproximadamente perpendicular à tensão. Durante o experimento foi possível identificar que o eixo de tensão estava próximo do eixo (0 1 -1) e confirmar o alinhamento prévio, como indicado na Figura 5.14(a).

Buscando identificar as mudanças que ocorrem na célula unitária ao se aplicar pressão uniaxial, foram escolhidas quatro direções diferentes de medidas, de forma que fosse possível

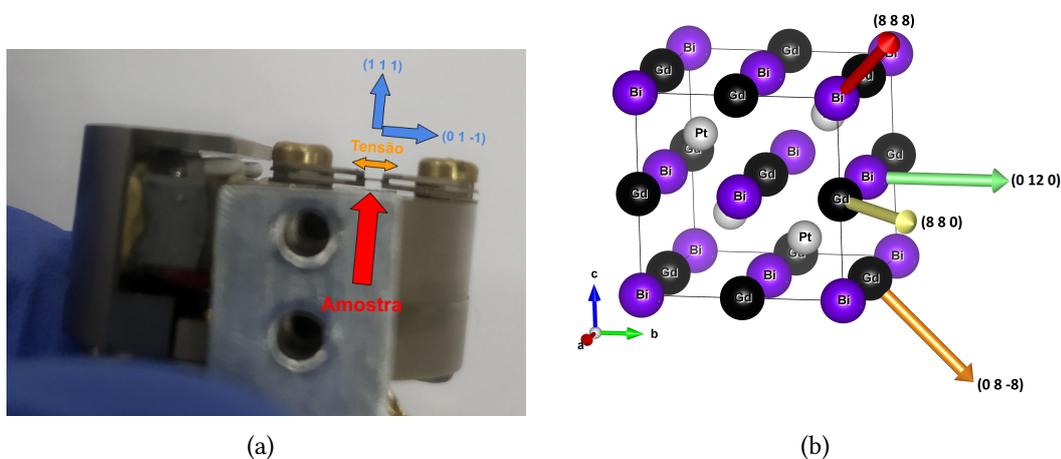


Figura 5.14: (a) Esquema da montagem e orientação do GdPtBi para o experimento de DRX em monocristais. (b) Célula unitária do GdPtBi com as direções medidas no experimento de DRX em monocristais.

obter as componentes ortogonais. As direções escolhidas foram (0 8 -8), que é próxima da deformação, (0 12 0), que possui um eixo puro, (8 8 0) e (8 8 8), que são quase perpendiculares à deformação. A Figura 5.14(b) ilustra a célula unitária com as respectivas direções escolhidas.

A Figura 5.15 mostra os picos de difração em função de  $2\theta$  para diferentes tensões nas direções escolhidas. É possível notar a movimentação dos picos de difração conforme se deforma o cristal, tendo a maior variação na direção (0 8 -8) por estar próximo da deformação. Também observa-se que o sentido do deslocamento do pico é invertido quando se compara as direções (8 8 0) e (8 8 8), perpendiculares à tensão, com a direção (0 8 -8). Nessas medidas variou-se os atenuadores utilizados e, por isso, as intensidades não ficaram comparáveis. Dessa maneira, optou-se por normalizá-los e observar apenas os deslocamentos.

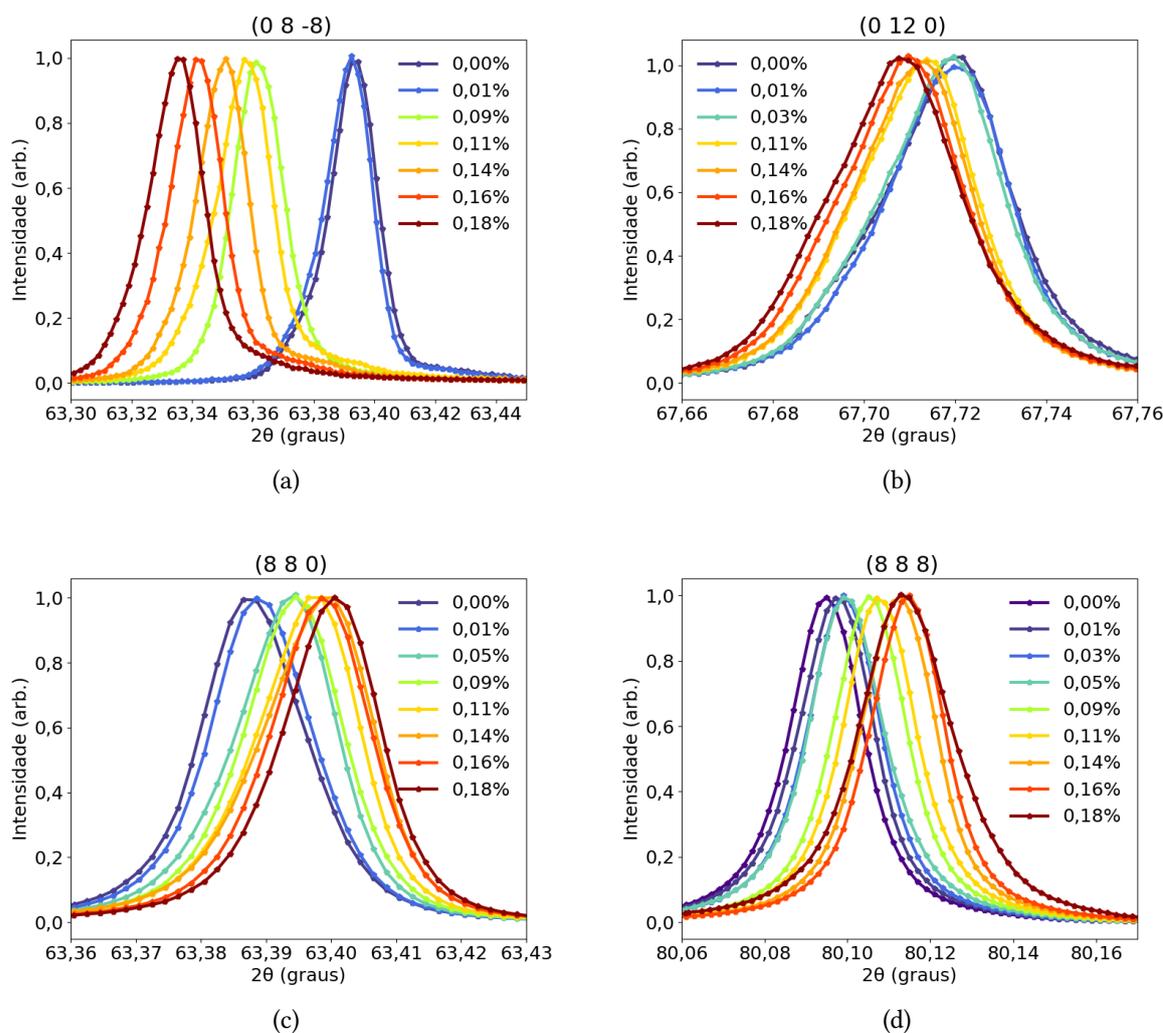


Figura 5.15: Difração de raios X de Mn<sub>3</sub>Sn em função dos ângulos de difração para diferentes tensões uniaxiais, nas direções (a) (0 8 -8), (b) (0 12 0), (c) (8 8 0) e (d) (8 8 8).

A partir desses deslocamentos estimou-se que a célula unitária cúbica poderia se deformar ligeiramente para uma estrutura monoclinica, ou seja, dois ângulos permanecem retos e todos os outros parâmetros variam. Com isso, foi possível calcular aproximadamente os parâmetros de rede variando em função da deformação, na Figura 5.16. Nota-se que apenas o parâmetro  $a$  diminui, enquanto os parâmetros  $b$  e  $c$  aumentam, justamente por  $a$  ser aproximadamente perpendicular à deformação e  $b$  e  $c$  terem grande componente paralela. Também é interessante observar que, para pequenas deformações, não parece haver um padrão nas mudanças dos parâmetros, ficando bem nítido em  $\epsilon = 0,3\%$ , mas, após um certo ponto, passa a variar em apenas um sentido, se aproximando de uma linearidade. Isso mostra que, inicialmente, a tensão uniaxial aplicada provocou um desequilíbrio na estrutura e, só a partir de tensões maiores, um novo equilíbrio foi encontrado. Isso provavelmente se deu porque a pressão uniaxial não estava perfeitamente alinhada a um eixo de grande simetria, forçando uma grande modificação na célula unitária no início. Apesar de todas as mudanças observadas, pelas variações dos parâmetros e pelos deslocamentos dos picos, não há indicativo de uma grande transição estrutural, apenas de pequenas deformações da célula unitária cúbica.

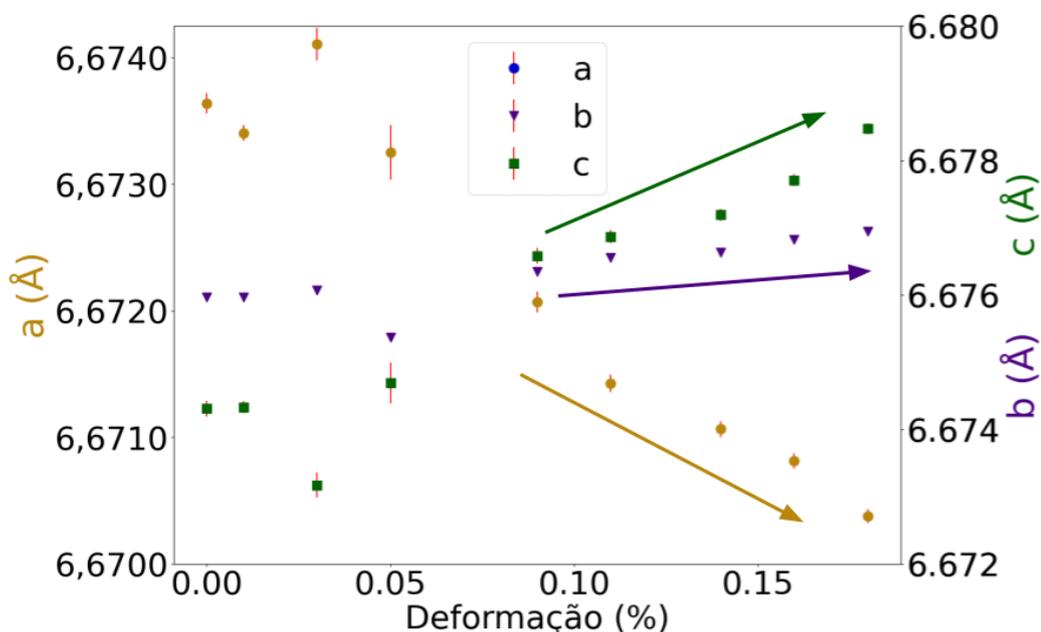


Figura 5.16: Parâmetros de rede aproximados do GdPtBi para diferentes tensões uniaxiais calculados a partir da difração de raios X. As setas sugerem uma tendência dos pontos.

Também foram calculadas as variações das distâncias interplanares dos planos medidos em função da deformação na célula de pressão uniaxial, na Figura 5.17. Aqui, novamente, observa-se que os planos de eixos perpendiculares à tensão se aproximam, enquanto os outros

planos se afastam. Entretanto, há uma divergência entre as magnitudes de variação de  $d_{888}$  e  $d_{880}$ , que pode ser justificada por não se ter um alinhamento perfeito e porque essas dimensões macroscópicas da amostra não são iguais. Comparando esses movimentos com a estrutura magnética, é como se os planos do Gd ordenados ferromagneticamente estivessem sendo esticados ao longo do próprio plano, enquanto os planos alternados antiferromagneticamente estivessem se aproximando uns dos outros. Dessa forma, apenas as distâncias e, possivelmente, as intensidades dos momentos variam, mantendo o mesmo tipo de estrutura magnética que antes, tornando coerente não ter sido observada mudança na  $T_N$  na Figura 5.6(a).

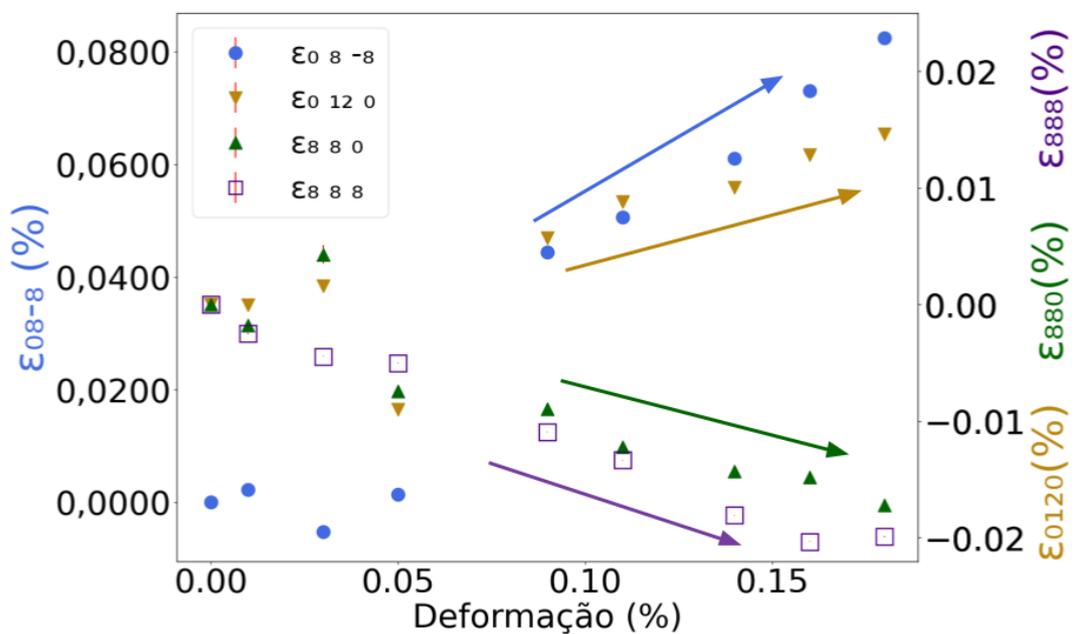


Figura 5.17: Variação nas distâncias interplanares dos planos medidos com DRX em função da deformação na célula de pressão uniaxial. As setas sugerem uma tendência dos pontos.

## Capítulo 6

### Conclusões e perspectivas

Neste projeto, o efeito da pressão uniaxial nas propriedades eletrônicas e estruturais dos compostos  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  e  $\text{GdPtBi}$  foi estudado. Mudanças em algumas das propriedades eletrônicas foram observadas, mas sem transição estrutural. De forma geral, os resultados indicam que a deformação trabalhada (ordem de  $\epsilon \sim 0,1\%$ ) é suficiente para modificar a suas topologias, ou seja, as bandas eletrônicas próximas da superfície de Fermi são sensíveis à pressão uniaxial.

Em específico, o efeito Hall anômalo em  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  sendo modificado com pressão uniaxial apenas ao longo do plano  $ab$  deixou evidente que a estrutura desse plano é fundamental no seu aparecimento. Mais do que isso, como não houve transição estrutural, o AHE é independente das distâncias interplanares dos planos  $ab$ , reforçando a ideia do efeito se originar da disposição antiferromagnética triangular não-colinear dos momentos magnéticos do Mn, cujo alinhamento parece ser sensível a modificações. Além disso, alterar essa geometria através da pressão uniaxial permite, de certa forma, controlar a amplitude do AHE.

Como perspectivas futuras nos estudos do  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  pode ser interessante realizar experimentos de DRX em monocristais com pressão uniaxial ao longo do plano  $ab$ , que foi o alinhamento que gerou as maiores mudanças no transporte elétrico, complementando o resultado de não haver transição estrutural envolvida. Estudar outras propriedades utilizando pressão uniaxial, como por exemplo o efeito Nerst anômalo, também seria bastante interessante, podendo conectar os efeitos elétricos e termoelétricos do material deformado. Nesse caso, ainda seria necessário desenvolver o aparato instrumental, mas todas essas observações são importantes para dar uma perspectiva mais clara da topologia não-trivial no  $\text{Mn}_3\text{Sn}$ . Além disso, pode ser válido também investigar as outras fases do material sob pressão em temperaturas mais baixas, como por exemplo a fase *spin glass* abaixo de 50 K.

---

No GdPtBi as mudanças nas propriedades de transporte elétrico foram sutis, mas importantes. O AHE mudou pouco mas seguiu um padrão em que a anomalia era enfraquecida com a compressão e fortalecida com a tensão. Já a MR variou mais, seguindo também um padrão, ficando mais positiva com a compressão e mais negativa com a tensão. Esse comportamento mostra que a compressão enfraquece a anomalia quiral, enquanto a tensão a fortalece. Entretanto, apesar das mudanças, a MR se manteve bastante negativa durante todo o processo. Todas essas mudanças apontam para modificações nas bandas próximas da FS, sendo evidenciado ainda mais pelas oscilações quânticas. Em especial, durante a compressão na amostra do primeiro crescimento, houve mudança de domínio de elétrons triviais para elétrons não-triviais na seção da FS observada. Ao mesmo tempo, as mudanças nas frequências mostram um movimento das bandas eletrônicas. Além disso, a mudança na curva de resistividade abaixo da  $T_N$  corrobora com a análise do movimento das bandas, indicando, durante a compressão, um possível afastamento do ponto em que as bandas se tocam em relação a FS. No entanto, pelo comportamento estrutural e por não haver mudança na  $T_N$ , a transição antiferromagnética não parece estar conectada diretamente com a topologia não-trivial.

Para os próximos passos, seria interessante buscar novos experimentos com pressão uniaxial para medir outras propriedades do GdPtBi, como por exemplo o efeito Hall planar. Além disso, também pode ser útil estudar outros materiais da mesma família RPtBi (R = Lantanídeo) para entender melhor o papel do Gd na topologia desse material.

Com tudo isso em vista, a técnica de pressão uniaxial utilizando piezoeletricidade se mostrou uma ferramenta muito útil para estudar materiais topológicos, dando novas informações e modificações nas propriedades macroscópicas que facilitam o entendimento do que está acontecendo microscopicamente. Isso é muito importante porque tanto  $Mn_3Sn$  como GdPtBi não possuem medidas diretamente das suas estruturas de bandas não-triviais, de forma que essas observações macroscópicas adicionam bastante em seus entendimentos. Além disso, o fato de se obter algum tipo controle das propriedades observadas traz novas possibilidades para aplicações específicas.

## Referências bibliográficas

- [1] N. Armitage, E. Mele e A. Vishwanath. “Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids”. Em: *Reviews of Modern Physics* 90.1 (2018), p. 015001.
- [2] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Holt-Saunders, 1976.
- [3] A. Bansil, H. Lin e T. Das. “Colloquium: Topological band theory”. Em: *Reviews of Modern Physics* 88.2 (2016), p. 021004.
- [4] M. V. Berry. “Quantal phase factors accompanying adiabatic changes”. Em: *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* 392.1802 (1984), pp. 45–57.
- [5] S. Blundell. *Magnetism in condensed matter*. OUP Oxford, 2001.
- [6] A. Burkov. “Weyl metals”. Em: *Annual Review of Condensed Matter Physics* 9 (2018), pp. 359–378.
- [7] A. I. Coldea. “Quantum oscillations probe the normal electronic states of novel superconductors”. Em: *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 368.1924 (2010), pp. 3503–3517.
- [8] B. D. Cullity. *Elements of X-ray Diffraction*. Addison-Wesley Publishing, 1956.
- [9] J. Deng et al. “Effect of residual strain on magnetic properties and Hall effect in chiral antiferromagnet Mn<sub>3</sub>Sn”. Em: *Journal of Physics D: Applied Physics* 55.27 (2022), p. 275001.
- [10] Y. Deng, R. Li e X. Liu. “Thickness dependent anomalous Hall effect in noncollinear antiferromagnetic Mn<sub>3</sub>Sn polycrystalline thin films”. Em: *Journal of Alloys and Compounds* 874 (2021), p. 159910.
- [11] R. Dos Reis et al. “Pressure tuning of the anomalous Hall effect in the chiral antiferromagnet Mn<sub>3</sub>Ge”. Em: *Physical Review Materials* 4.5 (2020), p. 051401.
- [12] A. Dwight. *Crystal structure of DyNiSb, DyPtSb and related compounds*. Rel. técn. 1974.
- [13] D. Elwell, H. J. Scheel e E. Kaldis. “Crystal growth from high temperature solutions”. Em: *Journal of The Electrochemical Society* 123.9 (1976), p. 319C.
- [14] R. Fuglsby et al. “Magnetism of hexagonal Mn<sub>1-5</sub>X<sub>0-5</sub>Sn (X= Cr, Mn, Fe, Co) nanomaterials”. Em: *Journal of Applied Physics* 117.17 (2015).
- [15] S. Fujita e K. Ito. *Quantum theory of conducting matter: Newtonian equations of motion for a Bloch electron*. Springer Science & Business Media, 2007.

- [16] L. He et al. “Quantum transport evidence for the three-dimensional Dirac semimetal phase in Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>”. Em: *Physical review letters* 113.24 (2014), p. 246402.
- [17] T. Higo et al. “Anomalous Hall effect in thin films of the Weyl antiferromagnet Mn<sub>3</sub>Sn”. Em: *Applied Physics Letters* 113.20 (2018).
- [18] M. Hirschberger et al. “The chiral anomaly and thermopower of Weyl fermions in the half-Heusler GdPtBi”. Em: *Nature materials* 15.11 (2016), pp. 1161–1165.
- [19] M. Ikhlas et al. “Piezomagnetic switching of the anomalous Hall effect in an antiferromagnet at room temperature”. Em: *Nature Physics* 18.9 (2022), pp. 1086–1093.
- [20] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. John Wiley & sons, inc, 2005.
- [21] A. Kreyssig et al. “Magnetic order in GdBiPt studied by x-ray resonant magnetic scattering”. Em: *Physical Review B* 84.22 (2011), p. 220408.
- [22] N. Kumar, S. N. Guin, C. Felser e C. Shekhar. “Planar Hall effect in the Weyl semimetal GdPtBi”. Em: *Physical Review B* 98.4 (2018), p. 041103.
- [23] K. Kuroda et al. “Evidence for magnetic Weyl fermions in a correlated metal”. Em: *Nature materials* 16.11 (2017), pp. 1090–1095.
- [24] L. Landau. “Diamagnetismus der metalle”. Em: *Zeitschrift für Physik* 64 (1930), pp. 629–637.
- [25] X. Li, C. Collignon et al. “Chiral domain walls of Mn<sub>3</sub>Sn and their memory”. Em: *Nature communications* 10.1 (2019), p. 3021.
- [26] X. Li, L. Xu et al. “Momentum-space and real-space Berry curvatures in Mn<sub>3</sub>Sn”. Em: *SciPost Physics* 5.6 (2018), p. 063.
- [27] Y. Li et al. “Negative magnetoresistance in Weyl semimetals NbAs and NbP: Intrinsic chiral anomaly and extrinsic effects”. Em: *Frontiers of Physics* 12 (2017), pp. 1–10.
- [28] Z. Liu, B. Zhou et al. “Discovery of a three-dimensional topological Dirac semimetal, Na<sub>3</sub>Bi”. Em: *Science* 343.6173 (2014), pp. 864–867.
- [29] Z. Liu, H. Chen et al. “Electrical switching of the topological anomalous Hall effect in a non-collinear antiferromagnet above room temperature”. Em: *Nature Electronics* 1.3 (2018), pp. 172–177.
- [30] Lombardi. “Não publicado”. Tese de dout. UNICAMP, 2024.
- [31] H.-Z. Lu e S.-Q. Shen. “Finite-temperature conductivity and magnetoconductivity of topological insulators”. Em: *Physical review letters* 112.14 (2014), p. 146601.
- [32] H.-Z. Lu e S.-Q. Shen. “Weak antilocalization and interaction-induced localization of Dirac and Weyl Fermions in topological insulators and semimetals”. Em: *Chinese Physics B* 25.11 (2016), p. 117202.
- [33] H.-Z. Lu e S.-Q. Shen. “Weak antilocalization and localization in disordered and interacting Weyl semimetals”. Em: *Physical Review B* 92.3 (2015), p. 035203.

- [34] B. Lv, T. Qian e H. Ding. “Experimental perspective on three-dimensional topological semimetals”. Em: *Reviews of Modern Physics* 93.2 (2021), p. 025002.
- [35] S. Majumdar, H. Majumdar, R. Österbacka e E. McCarthy. “Organic Spintronics”. Em: *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*. Elsevier, 2016. ISBN: 978-0-12-803581-8. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.00577-4>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128035818005774>.
- [36] V. V. Marchenkov e V. Y. Irkhin. “Magnetic States and Electronic Properties of Manganese Based Intermetallic Compounds  $Mn_2 Y Al$  and  $Mn_3 Z$  ( $Y = V, Cr, Fe, Co, Ni$ ;  $Z = Al, Ge, Sn, Si, Pt$ )”. Em: *Materials* 16.19 (2023), p. 6351.
- [37] T. Matsuda et al. “Room-temperature terahertz anomalous Hall effect in Weyl antiferromagnet  $Mn_3Sn$  thin films”. Em: *Nature communications* 11.1 (2020), p. 909.
- [38] *Measurement Platforms (MPMS/PPMS) and New Options*. <https://nanohub.org/resources/20560/watch?resid=29204&time=00:05:54>. Acessado em: 2023-10-16.
- [39] G. Mikitik e Y. V. Sharlai. “Manifestation of Berry’s phase in metal physics”. Em: *Physical review letters* 82.10 (1999), p. 2147.
- [40] *Mounting Samples Manual*. <https://razorbillinstruments.com/wp-content/uploads/2023/06/AP005-Mounting-samples-v4-3-Web.pdf>. Acessado em: 2023-09-18.
- [41] H. Murakawa et al. “Detection of Berry’s phase in a bulk Rashba semiconductor”. Em: *Science* 342.6165 (2013), pp. 1490–1493.
- [42] N. Nagaosa et al. “Anomalous hall effect”. Em: *Reviews of modern physics* 82.2 (2010), p. 1539.
- [43] S. Nakatsuji e R. Arita. “Topological magnets: Functions based on Berry phase and multipoles”. Em: *Annual Review of Condensed Matter Physics* 13 (2022), pp. 119–142.
- [44] R. Niu e W. Zhu. “Materials and possible mechanisms of extremely large magnetoresistance: a review”. Em: *Journal of Physics: Condensed Matter* 34.11 (2021), p. 113001.
- [45] V. L. Pokrovsky. “Landau and modern physics”. Em: *Physics-Uspekhi* 52.11 (2009), p. 1169.
- [46] *Razorbill Instruments Products*. <https://razorbillinstruments.com/>. Acessado em: 2023-09-18.
- [47] P. K. Rout, P. P. Madduri, S. K. Manna e A. K. Nayak. “Field-induced topological Hall effect in the noncoplanar triangular antiferromagnetic geometry of  $Mn_3Sn$ ”. Em: *Physical Review B* 99.9 (2019), p. 094430.
- [48] M. Sato e Y. Ando. “Topological superconductors: a review”. Em: *Reports on Progress in Physics* 80.7 (2017), p. 076501.
- [49] C. Schindler et al. “Anisotropic electrical and thermal magnetotransport in the magnetic semimetal  $GdPtBi$ ”. Em: *Physical Review B* 101.12 (2020), p. 125119.

- [50] C. Shekhar et al. “Anomalous hall effect in weyl semimetal half-heusler compounds RPtBi (R= Gd and Nd)”. Em: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 115.37 (2018), pp. 9140–9144.
- [51] C. Singh et al. “Pressure controlled trimerization for switching of anomalous Hall effect in triangular antiferromagnet Mn<sub>3</sub>Sn”. Em: *Physical Review Research* 2.4 (2020), p. 043366.
- [52] A. Sukhanov et al. “Gradual pressure-induced change in the magnetic structure of the noncollinear antiferromagnet Mn<sub>3</sub>Ge”. Em: *Physical Review B* 97.21 (2018), p. 214402.
- [53] Z. Sun et al. “Pressure-controlled anomalous Hall conductivity in the half-Heusler antiferromagnet GdPtBi”. Em: *Physical Review B* 103.8 (2021), p. 085116.
- [54] N. H. Sung, F. Ronning, J. D. Thompson e E. D. Bauer. “Magnetic phase dependence of the anomalous Hall effect in Mn<sub>3</sub>Sn single crystals”. Em: *Applied Physics Letters* 112.13 (2018).
- [55] T. Suzuki et al. “Large anomalous Hall effect in a half-Heusler antiferromagnet”. Em: *Nature Physics* 12.12 (2016), pp. 1119–1123.
- [56] S. Wang et al. “Quantum transport in Dirac and Weyl semimetals: a review”. Em: *Advances in Physics: X* 2.3 (2017), pp. 518–544.
- [57] X. Wang et al. “Noncollinear Mn<sub>3</sub>Sn for antiferromagnetic spintronics”. Em: *Materials Today Physics* (2022), p. 100878.
- [58] H. Weng, X. Dai e Z. Fang. “Topological semimetals predicted from first-principles calculations”. Em: *Journal of Physics: Condensed Matter* 28.30 (2016), p. 303001.
- [59] D. Xiao, M.-C. Chang e Q. Niu. “Berry phase effects on electronic properties”. Em: *Reviews of modern physics* 82.3 (2010), p. 1959.
- [60] J. Xiong et al. “Evidence for the chiral anomaly in the Dirac semimetal Na<sub>3</sub>Bi”. Em: *Science* 350.6259 (2015), pp. 413–416.
- [61] B. Yan e C. Felser. “Topological materials: Weyl semimetals”. Em: *Annual Review of Condensed Matter Physics* 8 (2017), pp. 337–354.
- [62] B. Yan e S.-C. Zhang. “Topological materials”. Em: *Reports on Progress in Physics* 75.9 (2012), p. 096501.
- [63] J. Yan et al. “Room-temperature angular-dependent topological Hall effect in chiral antiferromagnetic Weyl semimetal Mn<sub>3</sub>Sn”. Em: *Applied Physics Letters* 115.10 (2019).
- [64] C. Zener e J. Hollomon. “Problems in non-elastic deformation of metals”. Em: *Journal of applied Physics* 17.2 (1946), pp. 69–82.
- [65] D. Zhang et al. “First-principles study of the structural stability of cubic, tetragonal and hexagonal phases in Mn<sub>3</sub>Z (Z= Ga, Sn and Ge) Heusler compounds”. Em: *Journal of Physics: Condensed Matter* 25.20 (2013), p. 206006.

- 
- [66] J. Zhang, J. Chen et al. “Topological electronic state and anisotropic Fermi surface in half-Heusler GdPtBi”. Em: *Journal of Physics: Condensed Matter* 32.35 (2020), p. 355707.
- [67] J. Zhang, L. Jin et al. “Modulation of Weyl semimetal state in half-Heusler GdPtBi enabled by hydrostatic pressure”. Em: *New Journal of Physics* 23.8 (2021), p. 083041.
- [68] W. Zhao e X. Wang. “Berry phase in quantum oscillations of topological materials”. Em: *Advances in Physics: X* 7.1 (2022), p. 2064230.
- [69] B. E. Zuniga-Cespedes et al. “Observation of an anomalous Hall effect in single-crystal Mn<sub>3</sub>Pt”. Em: *New Journal of Physics* 25.2 (2023), p. 023029.
- [70] J. W. Zwanziger, M. Koenig e A. Pines. “Berry’s phase”. Em: *Annual review of physical chemistry* 41.1 (1990), pp. 601–646.