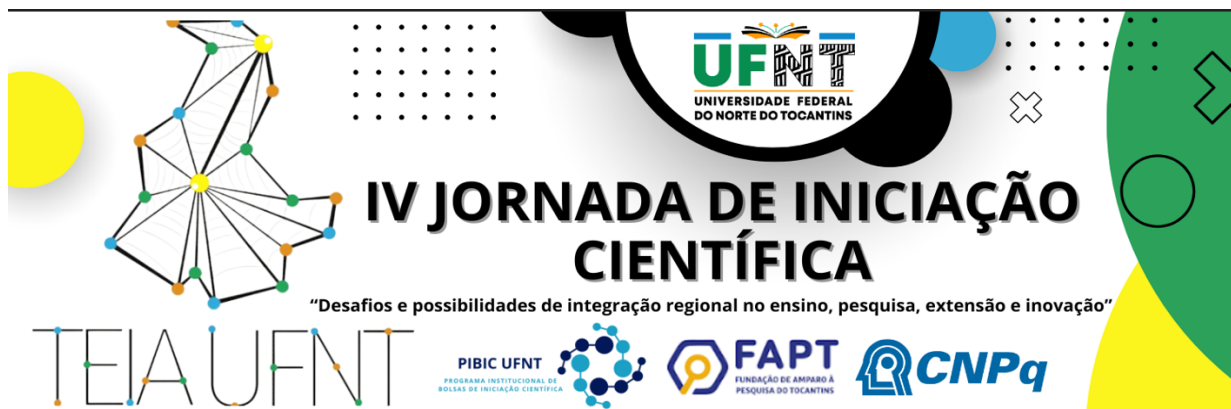


Influência dos Efeitos de Campo Elétrico Cristalino (CEF) sobre as Propriedades Magnéticas dos Compostos RCrO_3 (R = Terra Rara)
RESPLANDES, Arthur Rodrigues¹; MERCENA, Samuel Gomes

RESUMO

Este trabalho investiga as propriedades físicas dos compostos RCrO_3 (R = Dy, Er, Gd, Nd e Pr), por meio de simulações teóricas com dados experimentais de caracterização magnética. O desenvolvimento das atividades propostas neste projeto busca investigar e compreender os mecanismos microscópicos responsáveis pelas propriedades magnéticas de longo alcance, em especial os efeitos de campo cristalino (CEF). Nesse sentido, foram sintetizadas amostras DyCrO_3 , ErCrO_3 e GdCrO_3 . As amostras crescidas foram caracterizadas estruturalmente por meio de difração de raios x (DRX) e refinamento Rietveld. A análise dos padrões de DRX obtidos e o refinamento Rietveld mostram as estruturas obtidas. Além disso, análises espectroscópicas FTIR confirmaram a formação da estrutura perovskita ortorrômbica. O estudo dos efeitos do CEF foi realizado por meio de cálculos teóricos utilizando uma hamiltoniana para calcular as estimativas de separação dos níveis de energia dos íons terras raras. Neste caso os resultados mostram a presença de dubletos no estado fundamental para os compostos Dy, Er, Gd, Nd e singleto para a amostra de Pr, esses resultados encontram-se de acordo com dados reportados na literatura, evidenciando o potencial do CEF na explicação de comportamentos magnéticos atípicos. As ideias discutidas neste trabalho contribuem para as discussões acerca dos mecanismos

¹ Bolsista do Programa de Iniciação Científica (PIBIC/PIBITI). Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT), Centro de Ciências Integradas. Arthur.resplandes@ufnt.edu.br.



microscópicos envolvidos no magnetismo dessa família de compostos.

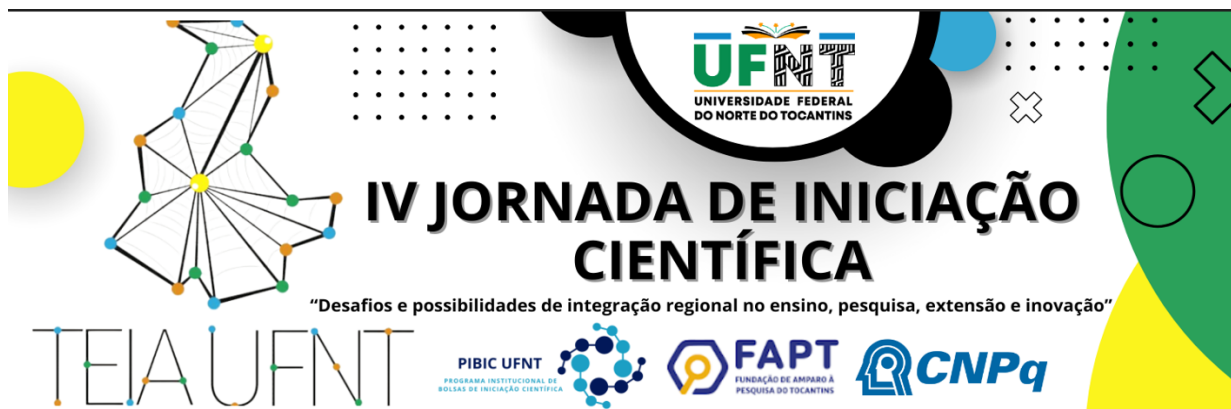
Palavras-chave: Campo Elétrico Cristalino; Magnetismo; Terras Raras

I. INTRODUÇÃO/JUSTIFICATIVA

A família dos compostos ortocromitas RCrO_3 apresenta propriedades magnéticas ricas e complexas, ainda não totalmente compreendidas pela comunidade científica. Fenômenos como reversão de magnetização, exchange bias e reorientação de spins têm sido atribuídos à competição entre interações magnéticas do íon Cr^{3+} e do íon terra rara, bem como à interação anisotrópica de Dzyaloshinskii-Moriya (BARTOLOME, 1994). Nesse contexto, os efeitos do CEF, responsáveis pela quebra da degenerescência dos níveis de energia dos íons R^{3+} , pode desempenhar um papel importante para a compreensão dos mecanismos microscópicos que governam tais propriedades. Nessa ótica, este trabalho busca contribuir para o entendimento desses fenômenos, realizando uma investigação sistemática que envolve análises experimentais e cálculos teóricos.

II. BASE TEÓRICA

A compreensão das propriedades magnéticas de compostos do tipo RCrO_3 requer o estudo das interações entre íons terras raras e metais de transição, destacando-se os efeitos do (CEF) e da interação anisotrópica de Dzyaloshinskii-Moriya (DM), que explicam fenômenos como ferromagnetismo fraco, reversão de magnetização e exchange bias. O CEF promove a quebra da degenerescência dos multipletos de energia dos íons terras raras, reorganizando níveis e possibilitando que estados fundamentais sejam magnéticos ou não, impactando a resposta do material a campos internos gerados pelo Cr^{3+} ordenado. O entendimento destes fenômenos



exige a análise detalhada das simetrias estruturais, dos parâmetros de rede, e das funções de onda associadas aos níveis de energia.

III. OBJETIVOS

Geral: Investigar os efeitos do CEF sobre as propriedades magnéticas de diferentes compostos RCrO_3 utilizando simulações de dados experimentais.

Específicos:

- Investigar a evolução dos parâmetros de CEF para cada composto da série;
- Entender o comportamento da temperatura de ordenamento e parâmetros de anisotropia magnética em função das terras raras;
- Examinar a distribuição dos níveis de energia, bem como as funções de onda do estado fundamental para cada composto;
- Entender microscopicamente os detalhes das interações magnéticas dominantes para cada composto.

IV. METODOLOGIA

A pesquisa foi dividida em etapas teórica e experimental. Na etapa teórica, foi realizada revisão de literatura e simulação computacional dos efeitos do CEF sobre os níveis energéticos dos íons terras raras. Experimentalmente, as amostras DyCrO_3 , ErCrO_3 e GdCrO_3 foram sintetizadas por co-precipitação e caracterizadas estruturalmente via difração de raios X (configuração Bragg-Brentano), seguida de refinamento Rietveld. A caracterização espectroscópica FTIR validou a formação da estrutura perovskita ortorrômbica esperada.

V. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os padrões de difração de raios x mostram a obtenção da fase desejada, mostrando simetria ortorrômbica nos compostos DyCrO_3 , ErCrO_3 (grupo espacial



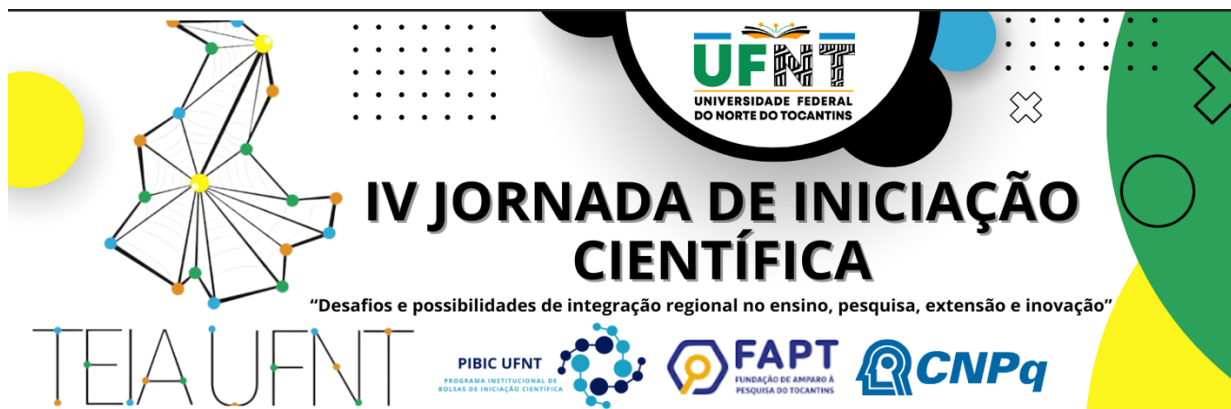
Pb_{nm}) e GdCrO₃ (Pnma). O refinamento Rietveld forneceu valores precisos de parâmetros de rede, volume de célula unitária e fatores de confiança do refinamento. As análises FTIR confirmaram bandas de vibração típicas dos modos CrO e OCrO, reforçando a formação das redes cristalinas. Nos cálculos do CEF, observou-se que Dy, Er e Nd apresentam dubletos separados por intervalos de energia (~60 K), enquanto Pr apresenta singletto (~48 K), impactando nas propriedades magnéticas e polarização dos íons terras raras. Os resultados teóricos alinham-se com dados da literatura.

VI. CONCLUSÃO/CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados obtidos neste projeto são promissores e reforçam a confiabilidade da metodologia adotada, visto que as amostras apresentaram boa qualidade estrutural, conforme verificado nas análises de difração de raios X. Embora não tenha sido possível realizar as simulações da caracterização magnética, os cálculos teóricos indicam uma configuração consistente dos níveis de energia do estado fundamental dos íons de terras raras. Esses resultados oferecem subsídios para a compreensão das interações entre as sub-redes de Cr³⁺ e R³⁺, que parecem ser determinantes para as propriedades magnéticas de longo alcance dos compostos. Como perspectivas futuras, pretende-se sintetizar novas amostras contendo diferentes íons de terras raras, realizar a caracterização magnética, ajustar os parâmetros de campo elétrico cristalino (CEF) de forma sistemática e investigar os efeitos de dopagens sobre as propriedades estruturais e magnéticas.

VII. REFERÊNCIAS

1. Barbosa, C. C. S. Estudo da correlação do efeito de Exchange bias com a magnetização reversa em ortocromitas do tipo Nd₁Pr, DyCrO₃. 2022.



2. Bartolome, F., Luis, F., Garcia, L. M. 1994. Exchange bias. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 136(3), 223-226.
3. Donni, A., Piro, O. 2020. Ferrimagnetism and exchange bias effect in the RCrO_3 (R = La, Sm, Gd, Tb, Ho, Tm) series of compounds. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 495, 165920.
4. Kimura, T., Goto, T., Shintani, H., Ishizaka, K., Arima, T., Tokura, Y. 2003. Magnetic control of ferroelectric polarization. *Nature*, 426(6962), 55-58.
5. Mercena, S. M., Das, R., Ranganathan, R., Dhanasekaran, T., Ramesh, R. 2021. Anomalous magnetic behavior of rare earth chromites (R = Y, Dy, Ho, and Er): effect of crystal electric field and magnetic frustration. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 32(7), 9639-9650.
6. Silva, R. L., Oliveira, N. A. 2017. Magnetic properties of RCrO_3 (R = La, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy) studied by Mössbauer spectroscopy. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 428, 364-368.
7. Zuo, Yuying et al. Optical and magnetoelectric coupling studies of ErCrO_3 . *Ceramics International*, 49, 33351-33357, 2023.

VIII. AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi desenvolvido no âmbito do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC), com o apoio da Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT), da Fundação de Amparo à Pesquisa do Tocantins (FAPT) e do LABMADE. Agradeço às instituições pelo incentivo à pesquisa científica e pelo suporte essencial à realização deste projeto.