

**SIEĆ NAUKOWA finansowana przez Polskie
Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego
w latach 2007-2009:**

**Materiały z silnie skorelowanymi elektronami:
otrzymywanie, badania podstawowe i aplikacje**

Plany badawcze na rok 2008 i 2009

Opis tematyki Sieci Naukowej oraz plany badawcze i raporty na rok 2007 zostały opublikowane w *Acta Physica* **26-28** (2009).

(published 31 July 2009; online: www.actaphysica.eu)

Na dzień 31.07.2009 brak danych nt. finansowania Sieci Naukowej na rok 2009.

Na dzień 31.07.2009 na stronie internetowej Sieci Naukowej: <http://msse.int.pan.wroc.pl/index.php5> brak jest informacji o raportach za 2008 rok oraz planach i raportach za 2009 rok.

SIEĆ NAUKOWA:

Materiały z silnie skorelowanymi elektronami - - Otrzymywanie, Badania Podstawowe i Aplikacje WNIOSEK Z XII 2006

I. Opis tematyki

II. **Plany badawcze i raporty na rok 2007**
opublikowane w Acta Physica **26-28** (2009) 1-60

III. Plany badawcze na rok 2008	21
1A. Zadanie 1/08 OPIS - Związki międzymetaliczne 4f- and 5f- elektronowe.....	22
1.1 Rola fluktuacji kwadropolowych w silnych korelacjach elektronowych	22
1.2 Stan podstawowy i własności termoelektryczne wypełnionych skutterudytów	23
1.3 Własności stanu nadprzewodzącego w zdegenerowanym półprzewodniku PbTe:Ti	25
1.4 Własności elektronowe związków metali ziem rzadkich z niestabilną powłoką 4f	26
1.5 Nietypowe uporządkowania dalekozasięgowe w układach f- elektronowych	27
1.6 Magnetyzm związków i stopów f-elektronowych z metastabilną strukturą krystaliczną	29
1.7 Właściwości magnetyczne i optyczne wolframianów ziem rzadkich.....	31
1B. Zadanie 1/08 RAPORT – brak informacji na stronie internetowej	31
2A. Zadanie 2 OPIS	31
2B. Zadanie 2/08 RAPORT – brak informacji na stronie internetowej	
3A. Zadanie 3 OPIS - Badania nadprzewodników wysokotemperaturowych i konwencjonalnych oraz struktur opartych o warstwy nadprzewodzące	34
3.1 Badanie współistnienia w mikroskali uporządkowania ferromagnetycznego i nadprzewodnictwa - badanie sztucznych heterostruktur naprzemiennie ułożonych epitaksjalnie warstw nadprzewodzących i ferromagnetycznych	35

3.2 Badanie nadprzewodnictwa dwuprzerwowego w elektronowo i dziurowo domieszkowanym dwuborku magnezu: zbadanie zmian właściwości stanu normalnego i nadprzewodzącego pod wpływem domieszkowania pasm σ i π dziurami i elektronami ...	36
3.3 Badania własności epitaksjalnych warstw manganitów.....	38
3B. Zadanie 3/08 RAPORT – brak informacji na stronie internetowej	
IV. Plany badawcze na rok 2009 – brak informacji na stronie internetowej	39

Według strony internetowej Sieci Naukowej:

<http://msse.int.pan.wroc.pl/index.php5>

SIEĆ NAUKOWA:

Materiały z silnie skorelowanymi elektronami

Otrzymywanie, Badania Podstawowe i Aplikacje

(źródło: <http://msse.int.pan.wroc.pl/index.php5>
published 31 July 2009; online: www.actaphysica.eu)

PLANY BADAWCZE 2008

W wyniku uzgodnień pomiędzy Partnerami jako cząstkowe zamierzenia projektowe Sieci w roku 2007 przyjęto:

* Związki międzymetaliczne $4f$ - and $5f$ -elektronowe (INTiBS PAN + IFM PAN + IF PAN, przy współpracy z IFUŚ oraz IF UJ)

* Struktura elektronowa związków międzymetalicznych (IFM PAN + INTiBS PAN, przy współpracy z IFUŚ oraz IF UJ)

* Badania nadprzewodników wysokotemperaturowych i konwencjonalnych oraz struktur opartych o warstwy nadprzewodzące. (IF PAN + INTiBS PAN, przy współpracy z IF UJ)

ZADANIE 1 (2008) - OPIS

Spis treści:

- 1 Związki międzymetaliczne $4f$ - and $5f$ -elektronowe
 - 1.1 Rola fluktuacji kwadrupolowych w silnych korelacjach elektronowych
 - 1.2 Stan podstawowy i własności termoelektryczne wypełnionych skutterudytów
 - 1.3 Własności stanu nadprzewodzącego w zdegenerowanym półprzewodniku PbTe:Tl
 - 1.4 Własności elektronowe związków metali ziem rzadkich z niestabilną powłoką $4f$
 - 1.5 Nietypowe uporządkowania dalekozasięgowe w układach f -elektronowych
 - 1.6 Magnetyzm związków i stopów f -elektronowych z metastabilną strukturą krystaliczną
 - 1.7 Właściwości magnetyczne i optyczne wolframianów ziem rzadkich

Związki międzymetaliczne 4*f*- and 5*f*-elektronowe

Związki międzymetaliczne, czyli takie, w których obok wiązania metalicznego występują jednocześnie również inne typy wiązań (np. kowalencyjne lub jonowe), stanowią wyjątkowo liczną grupę związków chemicznych. Z punktu widzenia współczesnej fizyki i chemii ciała stałego najciekawszą podgrupę tego typu związków stanowią związki międzymetaliczne lantanowców i aktynowców, które to wyróżniają się spośród pozostałych pierwiastków układu okresowego tym, że ich jony posiadają w sieci krystalicznej niezapełnione i „odsłonięte” powłoki elektronowe 4*f* (lantanowce) i 5*f* (aktynowce). Omawiane związki zawierają również pierwiastki przejściowe i/lub pierwiastki IV i V grupy układu okresowego, które z kolei wnoszą do wspólnej struktury elektronowej elektrony z powłok typu *d* i *p*.

Rola fluktuacji kwadrupolowych w silnych korelacjach elektronowych

Binarny związek 4*f* elektronowy PrPb₃, krystalizujący w strukturze regularnej typu AuCu₃, wykazuje fazowe przejście antyferrokwadrupolowe (AFQ) w TAFQ = 0.4 K, co zostało udokumentowane na drodze wszechstronnych badań eksperymentalnych. Z uwagi na lokalne kubiczne otoczenie sieciowe, stanem podstawowym jonu Pr³⁺ jest niekramersonowski dublet Γ_3 a pierwszym stanem wzbudzonym, oddalonym o 19 K, jest stan trypletowy Γ_4 . Okazuje się, że stan podstawowy jonu Pr³⁺ nie ulega zmianie jeśli związek poddać rozcieńczaniu lantanem, który jest pierwiastkiem pozbawionym elektronów 4*f*. Co więcej, biorąc pod uwagę fakt, że związek LaPb₃ jest izostrukuralnym, niemagnetycznym homologiem PrPb₃ należy się spodziewać, że niemagnetyczny dublet Γ_3 będzie również stanem podstawowym rozcieńczonych jonów Pr³⁺ w matrycy LaPb₃. W istocie, niskotemperaturowe pomiary ciepła właściwego i podatności magnetycznej zdają się wskazywać na taką możliwość (T. Kawae et al., Phys. Rev. Lett. 2006). Eksperymenty na Pr_xLa_{1-x}Pb₃ z $x \leq 0.05$ wykonano na próbkach polikrystalicznych, a uzyskane wyniki zdają się wskazywać na możliwość wystąpienia kwadrupolowego efektu Kondo.

Pierwsze eksperymenty wskazujące na uporządkowanie AFQ w PrPb₃ zostały wykonane w INTiBS (Z. Kletowski, P. Sławiński i T. Cichorek, JMMM 1996). Już wówczas badanym materiałem były monokryształy wyhodowane metodą wzrostu z fazy ciekłej. W ramach sieci „Materiały z silnie skorelowanymi elektronami” planuje się otrzymać monokryształy Pr_xLa_{1-x}Pb₃ o precyzyjnie określonej koncentracji jonów Pr³⁺ (nie

przekraczającej kilku procent). Stan podstawowy zostanie zdefiniowany w INTiBS w oparciu o pomiary ciepła właściwego, oporu elektrycznego i zmiennoprądowej podatności magnetycznej w zakresie temperatur do 0.08 K i w polach do 14 T. Wpływ wzrostu koncentracji Pr^{3+} na strukturę elektronową zostanie określony w IFM PAN.

W 2007 roku opracowano technologię otrzymywania monokrystalicznych próbek związku LaPb_3 dotowanego prazeodymem w ilościach nie przekraczających kilku procent. Ze względu na specyfikę układu fazowego lantan – ołów, krystalizację przeprowadzono z roztworu $\text{La:Pb}=17:83$. Otrzymane monokryształy $\text{La}(\text{Pr})\text{Pb}_3$ (regularne sześciiany o bokach 0.5 - 2 mm) wstępnie badano zarówno w wysokich polach magnetycznych ($B \leq 5$ T) jak i w bardzo niskich temperaturach ($T \leq 0.4$ K). Uzyskane wyniki, a w szczególności logarytmiczna zależność ciepła właściwego od temperatury $C/T \propto -\ln T$, wskazuje na realizację dwukanałowego stanu Kondo, wynikającego z oddziaływań kwadrupolowych (Γ_3 to stan podstawowy jonu Pr^{3+}). Z całą pewnością wyniki wykonywanych obecnie obliczeń struktury elektronowej (grupa prof. dr hab. Andrzeja Jezierskiego z IFM PAN w Poznaniu) pozwolą na lepsze zrozumienie oddziaływań elektronów przewodnictwa z momentami kwadrupolowymi w $\text{La}(\text{Pr})\text{Pb}_3$.

W dalszym etapie, celem weryfikacji otrzymanych wyników, planuje się przeprowadzenie podobnych badań dla układu $\text{Pr}_x\text{La}_{1-x}\text{InAg}_2$. Pomimo, że PrInAg_2 nie wykazuje uporządkowania kwadrupolowego aż do 0.05 K, to podobnie jak w PrPb_3 , stanem podstawowym jonu Pr^{3+} jest nie-kramersonowski dublet Γ_3 . Ponadto, niskotemperaturowe pomiary pojemności cieplnej wskazały na niezwykle dużą wartość elektronowego ciepła właściwego ($\gamma = 6.5$ J/K²mol). Obserwacja ta, wraz z niewielkim wpływem zewnętrznego pola magnetycznego na γ , sugerują silne korelacje między elektronami $4f$, znajdującymi się w niemagnetycznym stanie Γ_3 , a elektronami przewodnictwa.

Stan podstawowy i własności termoelektryczne wypełnionych skutterudyty

Grupa związków znana jako „skutterudyty”, z uwagi na niezwykle bogactwo zjawisk silnych korelacji elektronowych, cieszy się olbrzymim zainteresowaniem badaczy z różnych dziedzin fizyki ciała stałego. Materiały te swoją nazwę wywodzą od minerału zwanego skutterudytem CoAs_3 . Binarne skutterudyty o ogólnej formule TX_3 są tworzone przez pierwiastki z IX grupy układu okresowego $T = (\text{Co}, \text{Rh}, \text{Ir})$ z atomem pniktogenu $X = (\text{P}, \text{As}, \text{Sb})$. Włączenie elektrododatniego pierwiastka będącego dodatkowym składnikiem struktury krystalicznej jest

konieczne dla lepszej stabilizacji tych materiałów. Tak zmodyfikowane układy nazywa się wypełnionymi skutterudytami o ogólnej formule $M_yT_4X_{12}$ gdzie M to pierwiastek ziemi rzadkiej, aktynowca, metalu alkalicznego lub tal. Podczas gdy maksymalna wartość parametru wypełnienia y wynosi 1, to jego rzeczywista wartość silnie zależy fizykochemicznych relacji między kationem M a matrycą T_4X_{12} i może podlegać dużym wahaniom. Jest bardzo istotnym fakt, że w strukturze krystalicznej wypełnionych skutterudytów $M_yT_4X_{12}$ stabilizujące kationy M tkwią w dużych wolnych przestrzeniach „klatkach”, uformowanych przez matrycę T_4X_{12} .

Skutterudyty $M_yT_4X_{12}$, szczególnie te oparte na ziemiach rzadkich, przejawiają wyjątkowe bogactwo rozmaitych własności fizycznych świadczących o silnych korelacjach elektronowych. Warto wymienić choćby przejście typu metal-izolator, uporządkowania magnetyczne i kwadrupolowe, konwencjonalne vs. niekonwencjonalne nadprzewodnictwo, a skończywszy na własnościach ciężkofermionowych i obecnością magnetycznego (kwadrupolowego) kwantowego punktu krytycznego. Oprócz fascynujących własności stanu podstawowego, zainteresowanie wypełnionymi skutterudytami ma również czysto aplikacyjny charakter. Jest to wynik ich perspektywicznych własności termoelektrycznych. Optymalizacja współczynnika dobroci ZT, określającego sprawność urządzenia termoelektrycznego, wydaje się być bardzo obiecująca w $M_yT_4X_{12}$. Jest tak dlatego, że wysoki ZT wymaga materiałów z ciężkimi nośnikami o dużej ruchliwości, które jednocześnie wykazują niskie sieciowe przewodnictwo cieplne. Warunki te mogą zostać z powodzeniem spełnione w skutterudytach a to dlatego, że po pierwsze, atomy ziem rzadkich i niektórych aktynowców mogą być źródłem „ciężkich” elektronów typu f , a po drugie, kation M umieszczony w klatce posiada dużą swobodę co skutkuje zaburzeniami drgań sieci krystalicznej, a w konsekwencji prowadzi do obniżenia fononowego przewodnictwa cieplnego. Uzyskane do tej pory wyniki są na bardzo obiecujące.

Wypełniony skutterudyt $PrOs_4Sb_{12}$ już od momentu swego odkrycia (E.D. Bauer et al., Phys. Rev. B 2002). nieprzerwanie skupia na sobie uwagę zarówno eksperymentatorów jak i teoretyków zajmujących się szeroko rozumianymi silnymi korelacjami elektronowymi. Wynika to przede wszystkim z faktu, że jest to jak dotąd jedyny układ nadprzewodzący, w którym pary Coopera wydają się powstawać w wyniku fluktuacji momentów kwadrupolowych. Szczególnego podkreślenia wymaga fakt, że dla $PrOs_4Sb_{12}$ wykryto porządek antyferrokwadrupolowy w $T < 1.2$ K i w $4 < B < 12$ T. Niemniej, stanem podstawowym jonu Pr^{3+} okazał się być stan singletowy Γ_1 zamiast spodziewanego nie-kramersowskiego dubletu Γ_3 (moment kwadrupolowy). Fakt ten w

pewnym stopniu osłabia scenariusz biorący pod uwagę kluczową rolę fluktuacji kwadrupolowych w procesie przejścia $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$ do stanu nadprzewodzącego.

W INTiBS PAN opracowano w 2005 roku unikatową technologię uzyskiwania monokryształów wypełnionych skutterudydów opartych na As. Pomimo usilnych starań innych grup badaczy, INTiBS PAN jest jedynym ośrodkiem na świecie, w którym otrzymuje się tego typu monokryształy. W roku ubiegłym udało się otrzymać szereg nowych materiałów, spośród których $\text{CeRu}_4\text{As}_{12}$ i $\text{CeOs}_4\text{As}_{12}$ zasługują na szczególne wyróżnienie: podczas gdy stałoprądowa podatność magnetyczna wskazuje na mieszaną wartościowość jonu Ce w obu tych związkach, to ich niskotemperaturowe własności transportowe wykazują znaczne różnice. Opór elektryczny $\text{CeOs}_4\text{As}_{12}$ silnie wzrasta z obniżaniem temperatury poniżej 50 K wskazując na pojawienie się przerwy energetycznej rzędu kilku meV. Co istotne, w $T < 5$ K występuje silny, ujemny magnetoopór, który może świadczyć o hybrydyzacyjnym pochodzeniu przerwy energetycznej. Planowane eksperymenty, a szczególnie wpływ pola magnetycznego na elektronową składową ciepła właściwego pozwolą wyjaśnić czy w $\text{CeOs}_4\text{As}_{12}$ mamy do czynienia z rzadko spotykanym przypadkiem izolatora Kondo. Z kolei szereg obserwacji w poczynionych w milikelwinowym zakresie temperatur dla $\text{CeRu}_4\text{As}_{12}$ takich jak np.: logarytmiczna zależność ciepła właściwego od temperatury $C/T \propto -\ln T$ czy malenie oporu elektrycznego z temperaturą wg relacji $\rho(T) \propto T^{1.5}$ wskazuje na własności typu non-Fermi liquid. Dla wyjaśnienia tych oraz innych efektów obserwowanych dla wypełnionych skutterudydów arsenowych planowana jest współpraca z grupą prof. dr hab. Andrzeja Jezierskiego z IFM PAN w Poznaniu i grupą prof. dr hab. Józefa Spałka z Instytutu Fizyki UJ w Krakowie.

Z do tej pory otrzymanych skutterudydów arsenowych tylko te zawierające żelazo oraz $\text{CeRu}_4\text{As}_{12}$ charakteryzują się stosunkowo dużą siłą termoelektryczną (dla $\text{CeRu}_4\text{As}_{12}$ termosila wynosi ok. 60 V/K w $T > 200$ K). Niestety ich stosunkowo duży opór elektryczny dyskwalifikuje dotąd uzyskane związki jako obiecujące materiały termoelektryczne.

Własności stanu nadprzewodzącego w zdegenerowanym półprzewodniku PbTe:Tl

W ramach sieci „Materiały z silnie skorelowanymi elektronami” planuje się badania PbTe dotowanego talem. Badania te będą miały charakter interdyscyplinarny: IF PAN dysponuje olbrzymim doświadczeniem i wysoką technologią otrzymywania monokryształów układów binarnych opartych na pierwiastkach z IV i VI grupy układu okresowego. IFM PAN

wykona obliczenia struktury pasmowej, ze szczególnym uwzględnieniem wpływu domieszek talowych na koncentrację nośników ładunku elektrycznego i zamykanie się wąskiej przerwy wzbronionej. Zmiany stanu podstawowego PbTe wywołane wzrostem koncentracji Tl zostaną określone w INTiBS PAN. Szczególny nacisk będzie położony na własności stanu nadprzewodzącego ($T_C = 1.5$ K dla 3 koncentracji Tl) i towarzyszący mu ładunkowy efekt Kondo wynikający ze zdegenerowanego stanu walencyjnego ($6s^0$ i $6s^2$) jonów talu (Y. Matsushita et al. Phys. Rev. Lett. 2005). Podstawowym narzędziem badawczym będą pomiary ciepła właściwego. Zależność temperaturowa ciepła właściwego, pozwalająca na określenie charakteru przerwy energetycznej w stanie nadprzewodzącym, powinna wyjaśnić zależność między nadprzewodnictwem a anormalnym rozpraszaniem elektronów w stanie normalnym.

Z uwagi na dużą czasochłonność procesu krystalizacji, tematyka PbTe dotowanego talem znajduje się w początkowej fazie badań. Z drugiej jednak strony spodziewana wysoka jakość otrzymanych próbek (grupa prof. dr hab. R.R. Gałązki z IF PAN w Warszawie) oraz istniejący aparat badawczy w INTiBS PAN pozwalają zakładać szybkie uzyskanie interesujących wyników eksperymentalnych.

W dalszej części planuje się poszerzenie się badań niskotemperaturowych o takie układy jak np.: HgSe:Fe. Przypuszcza się, że pomiary własności transportowych HgSe:Fe w temperaturach milikelwinowych przyniosą szereg wartościowych informacji.

Własności elektronowe związków metali ziem rzadkich z niestabilną powłoką 4f

W związkach międzymetalicznych z cerem w zależności od położenia poziomu 4f względem poziomu Fermiego, elektrony 4f mogą wykazywać różny stopień hybrydyzacji z elektronami przewodnictwa. W zależności od jej wielkości związki te mogą być w stanie mieszanej walencyjności, wykazywać własności sieci Kondo a w niskich temperaturach mogą wykazywać własności ciężkofermionowe. Współzawodnictwo pomiędzy oddziaływaniem typu RKKY a oddziaływaniem typu Kondo może prowadzić do magnetycznych (ze zredukowanym momentem magnetycznym) i niemagnetycznych stężonych układów Kondo. Konkurencja między tymi oddziaływaniami prowadzi do tzw. diagramu Doniacha. Rozwinięciem tego diagramu jest model sieci Kondo autorstwa Doradzińskiego i Spałka.

Zachęteni sukcesem badań związku CeAgAl, przeprowadzonych w ramach sieci MSSE w roku 2007, planujemy kontynuować podobne prace na nowych lub słabo zbadanych potrójnych związkach ceru” CeIrSb i

Ce(Pd,Rh)Al. Próbkę zostaną otrzymane w Katowicach. Tam też zostanie przeprowadzona ich charakteryzacja rentgenowska oraz badania XPS. We Wrocławiu wykonane zostaną niskotemperaturowe pomiary ciepła właściwego, oporu elektrycznego, namagnesowania i podatności magnetycznej. Uzyskane wyniki eksperymentalne zostaną skonfrontowane z obliczeniami struktury elektronowej metodą TB-LMTO, LAPW i FPLO.

Drugim obszarem zainteresowań w kolejnym roku realizacji niniejszego projektu będzie zbadanie uporządkowania magnetycznego, efektu Kondo i zachowań ciężkofermionowych w międzymetalicznych związkach typu RM_4T (R – jon Y lub lantanowca; M = Ni, Cu; T = Mn, Al, Cu, In). Głównym celem zaproponowanego projektu jest wykonanie wszechstronnych badań tych związków w oparciu o takie metody jak ciepło właściwe, podatność magnetyczna, dyfrakcja neutronów i własności elektryczne. Odpowiednie próbki zostaną otrzymane metodą topienia indukcyjnego w ochronnej atmosferze argonu w Zakładzie Stopów Magnetycznych w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu, gdzie wykonana zostanie ich charakterystyka strukturalna (dyfrakcja rentgenowska) oraz magnetyczna (podatność magnetyczna dla temperatur od 2K). Badania termodynamiczne i elektryczne zostaną przeprowadzone w INTiBS PAN we Wrocławiu, a badania struktury elektronowej w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach. Pomiar siły termoelektrycznej, poza ustaleniem ewentualnej przydatności praktycznej tych związków dostarczy dodatkowych informacji o niskotemperaturowych anomaliach i własnościach elektronowych w pobliżu poziomu Fermiego. Analiza temperaturowa oporu elektrycznego dostarczy nam informacji o mechanizmach rozpraszania elektronów przewodnictwa. Z pomiarów temperaturowych ciepła właściwego zostanie wyznaczony udział drgań sieci i elektronów przewodnictwa. Kontakty międzynarodowe umożliwią nam przeprowadzenie zaawansowanych badań metodą dyfrakcji neutronów i określenie w oparciu o te wyniki struktury magnetycznej poszczególnych związków. Oczekiwany rezultatem jest zaobserwowanie uwarunkowanego składem stopów zmian w masie efektywnej oraz walencyjności ceru w ramach tej samej struktury krystalograficznej.

Nietypowe uporządkowania dalekozasięgowe w układach f -elektronowych

Niezwykłe właściwości fizyczne f -elektronowych materiałów metalicznych od lat skupiają zainteresowanie wiodących ośrodków naukowych na świecie. Stanowią bowiem prawdziwe laboratorium współczesnej fi-

zyki ciała stałego pozwalające obserwować m.in. współistnienie cząstek zlokalizowanych i zdelokalizowanych, wysokie gęstości stanów, silne korelacje dynamiczne i statyczne, różne rodzaje uporządkowania dalekiego zasięgu i przejścia fazowe, fluktuacje termiczne i kwantowe, oddziaływanie elektronów z siecią, złożone procesy rozpraszania elektronów na węzłach, spektakularne przejawy silnej anizotropii. Zainteresowanie układami *f*-elektronowymi wiąże się także z potencjalnymi zastosowaniami w najbardziej zaawansowanych technologiach m. in. materiałów magnetycznych, termoelektryków, materiałów o nietypowych własnościach transportowych silnie zależnych od czynników zewnętrznych takich jak temperatura, ciśnienie, pole magnetyczne. Układy elektronów silnie skorelowanych zawierających pierwiastki *f*-elektronowe są dzisiaj przedmiotem badań wiodących ośrodków naukowych na świecie i w Polsce. Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu może pochwalić się pionierskimi pracami w tej dziedzinie, zapoczątkowanymi jeszcze przez profesora W. Trzebiatowskiego, patrona Instytutu, koncentrującymi się głównie na związkach uranu.

Jednym z najbardziej zagadkowych zjawisk obserwowanych w układach *f*-elektronowych jest formowanie się dalekozasięgowego uporządkowania, różnego od najczęściej występującego uporządkowania dipolowego magnetycznego bądź elektrycznego. Z uwagi na trudność doświadczalnej weryfikacji takiego egzotycznego uporządkowania i mnogość pojawiających się hipotez, wiele badań pozostaje bez konkluzji, a w literaturze pojawia się termin „ukryty porządek” (hidden order, HO). Przykład jednego z bodaj najintensywniej badanych obecnie na świecie związków, URu₂Si₂, jest szczególnie wymowny. Badania termiczne dla tego związku sugerują przejście do zwykłej fazy antyferromagnetycznej w 17.5 K, ale oszacowany z innych pomiarów moment magnetyczny jest o rząd mniejszy niż wynikałoby to z ubytku entropii. Wśród hipotez rozważane były wzbudzenia kolektywne różnego typu kwazicząstek lub ich lokalnych złożań, indukowany antyferromagnetyzm podukładu elektronów zlokalizowanych, niewspółmierny antyferromagnetyzm orbitalny mikroprądów ładunku [Mineev, Zhitomirsky, Phys. Rev. B 72 14432 2005], niestabilność Landaua-Pomeranchuka [C. M.Varma and Lijun Zhu, PRL 96, 036405 (2006)] czy wreszcie uporządkowanie oktopoli [A. A. Kiss and P. Fazekas, Phys. Rev. B71, 54415 (2005)].

Podobne problemy występują w wielu innych międzymetalicznych związkach *f*-elektronowych [D.Kaczorowski and R.Troć, Landolt-Börnstein Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology, Group III: Condensed Matter, vol. 27-B7, Springer-Verlag, 2003; ibid. D.Kaczorowski, vol. 27-B8, 2004]. HO, czyli nie identyfikowalne pierwotnie uporządkowanie jest prawdziwym wyzwaniem

zarówno dla teoretyków i doświadczalników. Przedstawiony projekt wpisuje się w główny nurt badań. Prace będą obejmować m.in. rozbudowę mapy materiałowej występowania oraz badanie warunków istnienia HO, rozwijanie opisu mikroskopowego oraz modeli fenomenologicznych pozwalających weryfikować kolejne hipotezy, poszukiwanie nowych technik pomiarowych, rozwijanie istniejących. Wśród materiałów zostaną uwzględnione różne grupy związków od układów zlokalizowanych takich jak UPd₃, poprzez ferromagnetyki typu UGe₂, antyferromagnetyki USb₂, po ciężkofermionowe nadprzewodniki typu UPt₃. Obok wspomnianych wyżej fenomenologicznych modeli teoretycznych, przewiduje się rozwijanie prac nad najprostszymi modelami mikroskopowymi dla układów silnie skorelowanych pod kątem ukrytego porządku.

Magnetyzm związków i stopów *f*-elektronowych z metastabilną strukturą krystaliczną

Proponowane zagadnienia tworzenia magnetycznych faz amorficznych są w nurcie nowoczesnej tematyki rozwijanej m.in. w USA (Baltimore, Oak Ridge, Pittsburgh), w Japonii oraz wielu krajach europejskich. Ze względu na znaczne zainteresowanie przemysłu nowymi litymi materiałami amorficznymi (typu „bulk”) istnieje potrzeba, aby poznać ich własności i możliwości łatwego wytwarzania. Doskonale do tego celu nadają się fazy 1:6:6, które łatwo amorfizują (glass forming ability).

Obecnie obserwuje się powrót zainteresowania materiałami amorficznymi i ich strukturą. W szczególności jest to spowodowane współistnieniem (w różnych temperaturach) tak wykluczających się własności mechanicznych tych stopów, jak duża plastyczność i sprężystość. Jest to cecha, która zdecydowała o licznych zastosowaniach materiałów amorficznych, m.in. w przemyśle zbrojeniowym, lotniczym oraz medycynie. Zagadnienia rozwiązane w czasie realizacji proponowanego projektu mogą zaowocować wnioskami patentowymi interesującymi przemysł krajowy. Proponowane stopy wykazują bowiem dużą stabilność termiczną struktury krystalicznej i magnetycznej znacznie powyżej temperatury pokojowej, co kwalifikuje je do wielu zastosowań w przemyśle elektronicznym (spintronika, magnetoelektronika).

Celem podjętych od 2007 roku wspólnych badań w ramach sieci jest poznawanie zależności występowania uporządkowania magnetycznego, efektu Kondo, oddziaływania RKKY i innych zjawisk typowych dla międzymetalicznych związków i stopów ciężkofermionowych w zależności od strukturalnego nieporządku (faza amorficzna) i w funkcji wielkości ziaren (faza mikro- i nanokrystaliczna). We wstępnych badaniach wykaza-

liśmy, że skuteczną metodą wytwarzania w materiale różnych objętości frakcji krystalicznej w celu badania efektów rozmiarowych jest precyzyjnie wygrzewanie amorficznych prekursorów o składach chemicznych zapewniających tworzenie się odpowiedniej nanostruktury.

W tym celu, dla potrzeb niniejszego projektu, zostaną wytworzone metodą szybkiego schładzania z fazy ciekłej amorficzne taśmy Y-Al o składach identycznych do badanych wcześniej taśm z Ce (to jest Y(La)Al i Y(La)Al₂), których struktura będzie następnie zmieniana poprzez wygrzewanie. Oprócz poznania własności stopów posiadających strukturę ziarnistą zostaną zbadane własności taśm w stanie amorficznym, co np. dla stopów dwuskładnikowych CeAl okazało się niezwykle interesujące pod względem strukturalnym – dotychczas nie badano magnetyzmu (np. H.W. Sheng et al., “Polyamorphism in a metallic glass”, *Nature Mat.* 6, 2007, 192). Zagadnienia te zostały poruszone na 13th Czech and Slovak Conference on Magnetism -12. July 2007, Košice, Slovakia przez B. Idzikowskiego w formie wykładu pt. „Glass forming ability of pseudo-ternary DyMn_{6-x-y}Fe_{x+y}Ge_{6-x}Al_x (x, y = 0 to 6) alloys”. Tematyka ta odnosi się też do badanych stopów Ce-Al.

Składy proponowane do dalszych badań w roku 2008 zawierają pierwiastek niemagnetycznej ziemi rzadkiej oraz Al. Tak więc, cer będzie zastąpiony atomami itru lub lantanu. Wybór składu chemicznego związany jest z faktem, że Ce zawiera w powłoce 4f odpowiedzialnej za magnetyzm tylko jeden elektron. Powłoka ta może też być pusta. Pasmo 4f leży blisko poziomu Fermiego i można się spodziewać mieszanej wartościowości tego pierwiastka. Natomiast stopy zawierające lantan lub/i itr posłużą do analizy porównawczej własności ich magnetycznych odpowiedników.

Zadania szczegółowe na rok 2008: (i) wytworzenie faz amorficznych z La(Y)Al oraz scharakteryzowanie procesu ich krystalizacji, (ii) poznanie wpływu braku strukturalnego uporządkowania dalekiego zasięgu i struktury nanokrystalicznej na niektóre własności fizyczne, (iii) ustalenie składu fazowego struktury nano- i mikrokryształicznej oraz (iv) określenie własności magnetycznych, transportowych i ciepła właściwego.

Główne metody eksperymentalne: (i) dyfrakcja rentgenowska (badania strukturalne), (ii) różnicowa kalorymetria skaningowa (termiczna stabilność struktury, procesy krystalizacji), (iii) magnetometria wibracyjna i/lub magnetometria indukcyjna (badanie własności magnetycznych, pomiar namagnesowania i podatności magnetycznej) oraz (iv) pomiar oporu elektrycznego i ciepła właściwego. Badania będą prowadzone od 0,4 K do temperatury pokojowej.

Oczekuje się, że systematyczna redukcja rozmiarów ziaren w badanych układach doprowadzi do wzmocnienia własności ciężko-

fermionowych (znaczny wzrost wartości γ) i zmian w wartościach temperatur Kondo i Debye'a.

Właściwości magnetyczne i optyczne wolframianów ziem rzadkich

Celem rozpoczętych badań jest rozstrzygnięcie istnienia przejść magnetycznych w niskich temperaturach dla niektórych jednoskośnych dwuwolframianów ziem rzadkich $KRe(WO_4)_2$. Przeprowadzono wstępne badania ciepła właściwego dla dwuwolframianów gadolinu, iterbu i terbu w przedziale temperatur 0,35-3K (dla Tb 0,4-3K) bez pola i w polu magnetycznym do 1T (wykonano badania wyłącznie dla pola skierowanego wzdłuż kierunku b). We wszystkich trzech przypadkach w zerowym polu magnetycznym zaobserwowano anomalny wzrost ciepła właściwego wraz z obniżaniem temperatury. Niestety nie zaobserwowano maksimów mogących odpowiadać temperaturze przejścia magnetycznego (aby zaobserwować te maksima potrzebne są pomiary w jeszcze niższych temperaturach – w KTbW antyferromagnetyczne uporządkowanie może występować w subkelwinowym obszarze temperatur). W przypadku KGdW i KTbW w polu zerowym oprócz anomalii związanej prawdopodobnie z przejściem magnetycznym obserwuje się wkład typu Schottky'ego (maksima wydzielonych anomalii typu Schottky są zdecydowanie mniejsze od wartości ciepła właściwego obserwowanych w pomiarach). Zaobserwowane anomalie wraz ze wzrostem pola magnetycznego przesuwiają się w stronę wyższych temperatur.

ZADANIE 2 (2008) - OPIS

Struktura elektronowa związków międzymetalicznych

Obliczanie z pierwszych zasad struktury elektronowej związków międzymetalicznych metali 4f i 5f elektronowych (IFM PAN + INTiBS PAN, przy współpracy z IFUŚ oraz IF UJ)

Planowane jest badanie własności magnetycznych oraz struktury elektronowej związków międzymetalicznych R-T, (R - pierwiastek ziemi rzadkiej, T pierwiastek d-elektronowy). Związki tego typu są przedmiotem intensywnych badań ze względu na ciekawe własności magnetyczne i elektronowe, co w wielu przypadkach doprowadziło już do zastosowań praktycznych. Celem badań będzie określenie struktury elektronowej tych związków i powiązanie jej z własnościami magnetycznymi. Badania te w szczególności koncentrować się będą na związkach z lekkimi

pierwiastkami ziem rzadkich (La, Pr, Nd, Sm). Wykonane zostaną również obliczenia numeryczne zmierzające do interpretacji otrzymanych doświadczalnie widm fotoemisyjnych. Temat realizowany będzie przez wzajemnie uzupełniający się teoretyczno-doświadczalny zespół (IFM PAN oraz INTiBS PAN), który z powodzeniem współpracował w ostatnich latach. Obliczenia struktury elektronowej wykonywane zostaną w IFM PAN natomiast materiały do badań syntetyzowane będą w INTiBS PAN,

Obliczenia własności elektronowych powyższych układów z pierwszych zasad oraz teoretyczne zbadanie wpływu domieszek na własności termoelektryczne nowych związków międzymetalicznych umożliwi wytworzenie nowych układów o zadanych własnościach termoelektrycznych. We współpracy z partnerami sieci zostaną rozwinięte i zastosowane do obliczeń z pierwszych zasad metody umożliwiające efektywne uwzględnianie silnych korelacji elektronowych (LSD+U, DFMT. EXX). Uwzględnienie w obliczeniach korelacji elektronowych umożliwi interpretację zjawisk transportowych i magnetycznych w związkach międzymetalicznych na bazie lantanowców i aktynowców.

Od kilkunastu lat w IFM PAN prowadzone są obliczenia struktury elektronowej metodami ab initio, opublikowano około dwustu prac z tej dziedziny. Metody obliczeniowe są udoskonalane i stały się narzędziem pozwalającym nie tylko wytłumaczyć obserwowane własności materiałów, ale także przewidzieć, z dużą dokładnością i wiarygodnością, własności układów, które jeszcze nie zostały eksperymentalnie zbadane. Dokładność metod ab initio pozwala na rozstrzygnięcie problemów niedostatecznie zbadanych doświadczalnie, na przykład lokalizacji lub delokalizacji elektronów $5f$ w związkach aktynowców. Szczególnie wartościowe są wyniki obliczeń ab initio wtedy, gdy połączone są z badaniami eksperymentalnymi struktury elektronowej.

Jedną z potężnych metod takich badań jest rentgenowska spektroskopia fotoemisyjna (XPS), dająca informacje o gęstości stanów elektronowych w paśmie walencyjnym, w obszarze energii poniżej poziomu Fermiego. Dzięki współpracy z grupami eksperymentalnymi możliwe będzie eksperymentalne zweryfikowanie wyników obliczeń. Bardzo pomocnym narzędziem w określaniu własności fizycznych rozpatrywanych związków jest znajomość przestrzennego rozkładu powierzchni Fermiego. Posiadane oprogramowanie (LmtART, FPLO) umożliwi wyznaczanie powierzchni Fermiego w trzech wymiarach i narzędzia do jej wizualizacji, dzięki czemu rozkład powierzchni można obserwować pod dowolnym kątem. Rezultatem badań będą szczegółowe informacje o paśmie walencyjnym wymienionych wyżej związków międzymetalicznych z uranem i metalami ziem rzadkich. Dane takie są niezbędne do zrozumienia ano-

malii ciężkofermionowych, mieszanej walencyjności i innych efektów typowych dla związków uranu.

Bardzo istotnym punktem badań będzie określenie wpływu zastępowania ceru lantanem, czyli określenie własności magnetycznych, elektrycznych (opór elektryczny, siła termoelektryczna) i termodynamicznych (ciepło właściwe) związków międzymetalicznych R-T. Tego typu zastępowanie ceru niemagnetyczną ziemią rzadką pozwala obserwować przejście między różnymi stanami układu (magnetyzm, ciężkie fermiony, mieszana walencyjność).

Przedmiotem badań w roku 2008 będą związki $R_4Ni_3Pb_4$ ($R=La, Ce, Pr$) i $CeRh_3Si_2$. Wstępne wyniki uzyskane bez polaryzacji spinowej muszą być uszczegółowione, a następnie wykorzystane będą do obliczenia widm fotoemisyjnych, które będzie można porównać z wynikami pomiarów wykonanych np. w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach. Planowane jest zbadanie struktur magnetycznych tych związków, $Ce_4Ni_3Pb_4$ i $CeRh_3Si_2$ to antyferromagnetyki, a obliczenia pozwolą określić lokalne momenty magnetyczne na poszczególnych atomach.

Interesujące są również wyniki uzyskane wcześniej dla $UCoAs_2$. Układ jest magnetyczny i należałoby spodziewać się momentu raczej na uranie niż na kobaltcie. Brak jest pomiarów neutronowych. Obliczenia na bazie FPLO dały moment magnetyczny na formułę dużo niższy niż wartość doświadczalna. Momenty na uranie ($0.20 \mu_B$) i kobaltcie ($0.98 \mu_B$) są względem siebie antyrównoległe. Dalsze badania ab-initio wymagają użycia kodu, który pozwala uwzględnić orbitalną polaryzację. Zwykle powoduje to podwyższenie momentu orbitalnego, a to oznaczać może lepszą zgodność z eksperymentem. Zamiana uranu na tor może rzucić światło na kwestię istnienia momentu magnetycznego na atomach kobaltu.

Ponadto planowane są obliczenia własności elektronowych i magnetycznych związków $YbPd_2Sb$ i $YbPdSb$, które krystalizują w układzie regularnym i należą do rodziny tzw. faz Heuslera. Pierwszy z nich jest układem ciężkofermionowych, natomiast drugi jest rzadkim przykładem cieczy spinowej.

Metody obliczeniowe, które planuje się systematycznie wykorzystywać to: FPLO, Wien2k, Exciting, Openmx, Casino, Crystal06 oraz VASP.

Magnetyzm układów sfrustrowanych geometrycznie: Wpływ nieporządku chemicznego na właściwości magnetyczne układów typu kagome (IFM PAN + IF PAN)

Celem współpracy są obliczenia ab initio struktury elektronowej sfrustrowanych układów typu kagome: $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_8$ i $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_8$. W roku 2008 wspólnie z IFM PAN planujemy kontynuowanie rozpoczętych w 2007 roku obliczeń.

ZADANIE 3 (2008) - OPIS

Spis treści

1 Badania nadprzewodników wysokotemperaturowych i konwencjonalnych oraz struktur opartych o warstwy nadprzewodzące

1.1 Badanie współlistnienia w mikroskali uporządkowania ferromagnetycznego i nadprzewodnictwa - badanie sztucznych heterostruktur naprzemiennie ułożonych epitaksjalnie warstw nadprzewodzących i ferromagnetycznych

1.2 Badanie nadprzewodnictwa dwuprzerwowego w elektronowo i dziurowo domieszkowanym dwuborku magnezu: zbadanie zmian właściwości stanu normalnego i nadprzewodzącego pod wpływem domieszkowania pasm σ i π dziurami i elektronami

1.3 Badania własności epitaksjalnych warstw manganitów

Badania nadprzewodników wysokotemperaturowych i konwencjonalnych oraz struktur opartych o warstwy nadprzewodzące

Badania wielociałowego stanu podstawowego, jakim jest stan nadprzewodzący, pozostają w centrum zainteresowania współczesnej fizyki materii skondensowanej. Jednym z ciekawszych problemów jest bogactwo diagramu fazowego nadprzewodników wysokotemperaturowych (NW), które stanowi wyzwanie dla najlepszych laboratoriów badawczych na świecie. Z jednej strony, badania ukierunkowane są na zrozumienie mechanizmu nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego, który ciągle jeszcze nie jest dokładnie poznany, pomimo upływu dwóch dekad od odkrycia pierwszych NW. Z drugiej zaś strony, mnogość faz, wynikająca z obecności silnych korelacji elektronowych i oddziaływań magnetycznych, oraz względna łatwość manipulacji nimi, kuszą możliwościami wglądu w najbardziej fundamentalne problemy fizyki materii skondensowanej, takie jak przejście porządek-nieporządek czy

metal-izolator (MI). Wreszcie, ważną dziedziną są badania własności sieci wirów w stanie mieszanym nadprzewodników II-go rodzaju, które są szczególnie istotne dla potencjalnych zastosowań warstw i struktur nadprzewodzących w nowoczesnej elektronice. Tym klasom zagadnień poświęcona jest proponowana tematyka.

Badanie współlistnienia w mikroskali uporządkowania ferromagnetycznego i nadprzewodnictwa - badanie sztucznych heterostruktur naprzemiennie ułożonych epitaksjalnie warstw nadprzewodzących i ferromagnetycznych

W perowskitach zawierających jony manganu lub kobaltu mamy do czynienia ze zjawiskiem kolosalnego magnetooporu (CMR), w perowskitach zawierających jony miedzi ze zjawiskiem nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego (HTSC). Jedną z ciekawszych gałęzi badań, które stwarzają obecne możliwości technologiczne, jest projektowanie, wzrost i badanie sztucznych heterostruktur np. naprzemiennie ułożonych epitaksjalnych warstw nadprzewodzących (S) i ferromagnetycznych (F).

Heterostruktury typu CMR/HTSC stanowią bardzo interesującą klasę układów do badania efektu bliskości w układach typu F/S. W tego typu heterostrukturach dwa podukłady związków tlenkowych rosną naprzemiennie utrzymując wzrost epitaksjalny. Grubość każdego podukładu może zaczynać się od grubości jednej stałej sieciowej tak, że próbki tego rodzaju stanowią swego rodzaju sztucznie wytworzone monokryształy. Ponadto dodatkową zaletą jest to, że stan podstawowy próbek można kontrolować poprzez poziom domieszkowania.

Jako wzorcowy może być potraktowany układ $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ (LSMO), który dla poziomu domieszkowania poniżej $x < 0.15$ jest ferromagnetycznym izolatorem (FI), dla poziomu domieszkowania $0.15 < x < 0.45$ układ LSMO jest ferromagnetycznym metalem (FM), natomiast dla poziomu domieszkowania $x \sim 0.55$ układ jest antyferromagnetycznym metalem (AFM). Faza LSMO dla różnego poziomu domieszkowania charakteryzuje się podobnymi parametrami stałych sieciowych, zatem w strukturze wielowarstwowej można zaobserwować zmianę stanu nadprzewodzącego spowodowaną własnościami elektrycznymi i magnetycznymi warstw przylegających, eliminując efekt naprężenia, który będzie podobny dla wszystkich poziomów domieszkowania ze względu na podobne wartości stałych sieciowych układu LSMO. Układy La-Sr-Mn-O czy Nd-Sr-Mn-O są manganitami o przewodnictwie typu dziurowego. Istnieją sugestie, że układ typu La-Ce-Mn-O jest układem o przewodnictwie typu elektronowego. Unikatową właściwością manganitów jest możliwość zmiany ich właściwości przez oświetlenie. W ten sposób można

zmieniać koncentrację nośników, indukować przejście metal-izolator i inne strukturalne i magnetyczne przejścia-fazowe.

W ramach dotychczasowych wspólnych prac wykonano serię próbek: dwuwarstw $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ (60 nm)/ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (60 nm) (LSMO/YBCO) oraz trójwarstw LSMO (10 nm)/YBCO (19 stałych sieciowych c)/LSMO (24 nm). Próbki te zostały scharakteryzowane strukturalnie, wykazując wzrost epitaksjalny. Na wytworzonych próbkach zostaną przeprowadzone pomiary podatności magnetycznej. Tego typu pomiary pozwolą na głębsze zrozumienie efektu bliskości w układzie ferromagnetyk/nadprzewodnik. Pomiary pozwolą na określenie dynamiki sieci wirów w różnych obszarach temperaturowych, w szczególności w obszarze formowania się spontanicznej sieci wirów.

Badanie nadprzewodnictwa dwuprzzerwowego w elektronowo i dziurowo domieszkowanym dwuborku magnezu: zbadanie zmian właściwości stanu normalnego i nadprzewodzącego pod wpływem domieszkowania pasm σ i π dziurami i elektronami

Dwuborek magnezu MgB_2 jest związkiem dwuskładnikowym o prostej warstwowej strukturze, który przechodzi w stan nadprzewodzący poniżej $T_C = 39$ K. Teoretyczne obliczenia struktury pasmowej i oddziaływań elektron-fonon pokazały wyjątkową cechę stanu nadprzewodzącego w MgB_2 – nośniki prądu nadprzewodzącego tworzą się w dwóch różnych pasmach. Konsekwencje tego faktu ujawniają się w bardzo wielu eksperymentach. Jednak ciągle nieznana jest odpowiedź na podstawowe pytanie: w jaki sposób „dwupasmowa” natura nadprzewodnictwa wpływa na główne parametry charakteryzujące stan nadprzewodzący oraz jak wpływa na ich anizotropię. Jednym z celów prowadzonych badań jest określenie, w jakim stopniu wartości parametrów opisujących stan nadprzewodzący, związane z różnymi pasmami, mogą być modyfikowane poprzez podstawienia chemiczne. Podstawienia powinny być bardzo skutecznym narzędziem, umożliwiającym lepsze poznanie mechanizmu nadprzewodnictwa w tym związku. Dodatkowym interesującym faktem zarówno z punktu widzenia zastosowań jak i badań podstawowych jest to, że w MgB_2 wpływ fluktuacji termicznych na zachowanie się wirów jest „pośredni” – zdecydowanie mniejszy niż w przypadku nadprzewodników wysokotemperaturowych, lecz większy niż w nadprzewodnikach konwencjonalnych. Możliwości praktycznych zastosowań MgB_2 są jednak ograniczone z powodu stosunkowo małej wartości drugiego pola krytycznego – w polu $H||c$ wartość $H_{C2}(0)$ jest rzędu 30 kOe. W chwili obecnej jest już dobrze ugruntowany pogląd, że podstawienia chemiczne modyfikują podstawowe parametry tego związku, czyniąc go bardziej przydatnym

do zastosowań dzięki zwiększeniu wartości pola $H_{C2}(T)$ oraz zwiększeniu wartości prądów krytycznych. Planowane badania wpływu podstawień chemicznych na obserwowane w stanie mieszanym przejścia fazowe w „materii wirów” pozwolą na określenie i zoptymalizowanie zakresu pól magnetycznych i temperatur, przydatnego do zastosowań. Badania te będą miały również duże znaczenie dla zrozumienia ogólnego diagramu fazowego sieci wirów w nadprzewodnikach II rodzaju.

W pierwszym roku realizacji projektu zbadano zarówno wpływ podstawień chemicznych w pozycję Mg jak i B, wszystkie pomiary były prowadzone na monokryształach – ma to bardzo istotne znaczenie ze względu na silnie anizotropowy charakter parametrów opisujących właściwości stanu nadprzewodzącego tego związku. Zarówno podstawienie C w pozycję B jak i Al w pozycję Mg wprowadza dodatkowe elektrony do MgB_2 – domieszkowanie to jest domieszkowaniem elektronowym. Podstawienie węgla w pozycję boru okazało się jedną z najbardziej interesujących modyfikacji, prowadzącą do wzrostu drugiego pola krytycznego zarówno w konfiguracji pola magnetycznego równoległego do osi c, $H_{C2} \parallel c$, jak i w konfiguracji pola magnetycznego prostopadłego do osi c, $H_{C2} \parallel ab$, oraz do malenia anizotropii drugiego pola krytycznego γ . Takie zachowanie może być wyjaśnione poprzez malenie średniej drogi swobodnej w konsekwencji rosnącego rozpraszania wewnątrzpałmowego w paśmie σ . Określono również wpływ podstawienia węgla na pierwsze pole krytyczne H_{C1} , długość koherencji, ξ , głębokość wnikania, λ , i parametr Ginzburg-Landaua, κ . Natomiast podstawienie aluminium w pozycję magnezu obniża zarówno $H_{C2} \parallel c$ jak i $H_{C2} \parallel ab$, z wyjątkiem małego wzrostu $H_{C2} \parallel c$ przy niskim poziomie domieszkowania. Obniża również anizotropię H_{C2} , czyniąc ją słabiej zależną od temperatury. Pomiary pierwszego pola krytycznego H_{C1} w monokryształach z aluminium pokazały, że anizotropia H_{C1} wynosi ok. 1.5, słabo zależy od temperatury i tylko nieznacznie maleje na skutek podstawienia.

Planowana jest kontynuacja wspólnych prac. Zbadany ma być wpływ domieszkowania dziurowego, głównie podstawień Li+1 na właściwości elektronowe monokryształów MgB_2 : T_C , drugie pole krytyczne i jego anizotropię. Wpływ ten powinien być diametralnie różny od wpływu domieszkowania elektronowego. Planowane jest również zbadanie roli podstawień Li przy równoczesnym domieszkowaniu litem i węglem. Badana będzie możliwość skompensowania efektu zmniejszania T_C w wyniku domieszkowania elektronami poprzez równoczesne domieszkowanie dziurami. Zjawisko takie mogłoby mieć implikacje praktyczne, ponieważ mogłoby zapobiec spadkowi T_C w MgB_2 z podstawionym węglem bez straty korzystnego wzrostu H_{c2} wywołanego tym podstawieniem.

Wyniki dotychczasowych wspólnych prac opublikowano w artykule:

J. Karpinski, N.D. Zhigadlo, S. Katrych, R. Puzniak, K. Rogacki, R. Gonnelli "Single crystals of MgB_2 : Synthesis, substitutions and properties", *Physica C* 456 (2007) 3.

Badania własności epitaksjalnych warstw manganitów

Manganity, zarówno w postaci cienkich warstw jak i w postaci litej wykazują wiele podobieństw do materiałów WN, w tym występowanie przejścia metal-izolator, ale procesy w nich zachodzące są dodatkowo komplikowane przez obecność oddziaływań magnetycznych oraz silnego sprzężenia elektron-fonon, co prowadzi do całego szeregu unikatowych anomalii własności elektrycznych i magnetycznych. Najbardziej znane zjawisko kolosalnego magnetooporu (CMR) badane jest bardzo intensywnie ze względu na możliwe wykorzystanie do zapisu informacji. Istnieje szereg teorii, które wiążą występowanie zjawiska CMR z obecnością mikroskopowej separacji fazy, i sporo doświadczeń, które wskazują na to, że rzeczywiście taka mikroskopowa separacja ma istotny wpływ na własności manganitów w pobliżu magnetycznego przejścia fazowego.

W IF PAN prowadzone są badania wpływu niejednorodności mikrostrukturalnych na przewodnictwo i podatność magnetyczną w warstwach manganitów typu $LaSr(Ca)MnO_3$, osadzanych z tarcz o składzie chemicznym $La_{0.6}Sr_{0.2}Mn_{1.2}O_3$ oraz $La_{0.67}Ca_{0.33}MnO_3$, na podłożach różnych typów ($SrLaGaO_4$, $Nd_3Ga_5O_{12}$, $Gd_3Ga_5O_{12}$, SiO_2/Si , oraz mieszane kryształy $(LaAlO_3)_{1-x}(Sr_2AlTaO_6)_x$), dla różnych warunków wzrostu. Generalnie, zależnie od warunków wzrostu i typu użytego podłoża obserwuje się powstawanie bardzo różnych niejednorodności mikrostrukturalnych, tj. mikroskopijnych klastrów o różnych typach porządku krystalograficznego, co ma bardzo duży wpływ na własności transportowe i magnetyczne warstw. Pokazano, że warstwy zachowują się jak mieszanina dwóch faz, metalicznej i izolującej, i przewodnictwo może być zrozumiane jako zależny od składu chemicznego efekt tunelowania nośników prądu między metalicznymi obszarami, przy czym istnieje duży wpływ magnetycznego przejścia fazowego na rozmiary mikroskopijnych klastrów, i co za tym idzie, na przewodnictwo. Badania takie będą kontynuowane.

W IF PAN odkryty został kilka lat temu inny efekt, anomalny efekt akustoelektryczny (AEAE), który zaobserwowany został w warunkach propagacji powierzchniowych fal akustycznych w warstwach $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$ osadzanych na tytanianie strontu. Efekt ten najwyraźniej związany jest z modulacją przewodności elektrycznej przez fale akustyczne w warstwie, i dominuje w pobliżu dwóch przejść fazowych, które w występują w $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$ w zbliżonej temperaturze, przej-

ścia metal-dielektryk oraz przejścia magnetycznego. Dokładna natura efektu nie jest jeszcze dobrze zrozumiana. Przedmiotem dalszych prowadzonych w IF PAN badań jest określenie, jaka jest rola uporządkowania magnetycznego oraz gigantycznej magnetostrykcji w powstawaniu AEAE.

Badania te prowadzone są w warstwach tlenków manganowo-lantanowych o różnych składach, typu $(\text{La}_{1-x}\text{A}_x)_{1-y}\text{Mn}_{1+y}\text{O}_3$ oraz $\text{La}_{1-y}\text{Mn}_{1+y}\text{O}_3$, gdzie $\text{A}=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}/\text{Pb}, \text{Ba}/\text{Sn}$, $x=0-0.5$, $y=0-0.3$. Część składów dobrana jest tak, aby oba wyżej wzmiankowane przejścia fazowe występowały w istotnie różnych temperaturach. Badanych jest szereg własności transportowych, rezonansowych i magnetycznych, w tym z użyciem deformacji liniowych warstwy, które wprowadzają ciśnienia rozciągające lub ściskające.

PLANY BADAWCZE 2009

Na stornie: <http://msse.int.pan.wroc.pl/index.php5/Zadania2009> jest informacja:

Nie ma jeszcze artykułu o tym tytule.