

Nr umowy: UMO-2017/25/B/ST3/02586

Tytuł: Badanie własności strukturalnych i dynamicznych układów silnie skorelowanych i nanostruktur metali przejściowych

Cel projektu

Nanostruktury zawierające metale przejściowe posiadają bardzo ciekawe własności z punktu widzenia badań podstawowych oraz ogromny potencjał aplikacyjny. Przykładem nanostruktur, które mogą zostać wykorzystane w nanotechnologii, są omawiane w tym projekcie związki żelaza z krzemem. Układy te położone na odpowiedniej powierzchni potrafią samoorganizować się w formie uporządkowanych nanostruktur typu klastrów i nanodrutów. Ze względu na duże przewodnictwo elektryczne i dużą stabilność chemiczną materiały te mogą być wykorzystane do tworzenia połączeń elektrycznych w nowych urządzeniach elektronicznych, a ich własności magnetyczne powodują, że mogą być użyte w spintronice. Zmniejszona wymiarowość układów może mieć także istotny wpływ na własności nadprzewodzące, czego przykładem jest monowarstwa FeSe na podłożu SrTiO₃. Znaczny wzrost temperatury krytycznej przejścia do fazy nadprzewodzącej daje możliwość technologicznego wykorzystania tego układu. Duże znaczenie badanych układów w nanotechnologii powoduje iż bardzo ważne stało się opracowanie teoretycznego opisu omawianych struktur. Posiadanie modeli teoretycznych umożliwia zbadanie nowych zjawisk takich jak niekonwencjonalne nadprzewodnictwo w materiałach z żelazem.

Celem nadrzędnym obecnego projektu jest zbadanie podstawowych zależności między strukturą krystaliczną, a własnościami elektronowymi i dynamiką sieci w wybranych związkach oraz układach nanostrukturalnych zawierających metale przejściowe. Zastosowanie nowoczesnych metod obliczeniowych z pierwszych zasad umożliwi rozwiązanie dobrze zdefiniowanych i dotychczas niewyjaśnionych problemów badawczych. W ramach planowanego projektu wykonane zostaną obliczenia z pierwszych zasad struktury krystalicznej i elektronowej magnetytu w fazie jednoskośnej, która występuje w temperaturach poniżej przejścia Verweya. Dla zoptymalizowanej struktury wyznaczone zostaną fononowe relacje dyspersji i gęstości stanów, co pozwoli zbadać własności dynamiczne sieci i zweryfikować hipotezę o silnym oddziaływaniu elektron-fonon w niskotemperaturowej fazie magnetytu. Celem obliczeń dla nadprzewodników na bazie żelaza jest zbadanie własności strukturalnych, elektronowych i fononowych tych materiałów w funkcji ciśnienia i domieszkowania. Wyznaczona struktura pasmowa pozwoli na wyprowadzenie modeli typu ciasnego wiązania w reprezentacji funkcji Wanniera i wyliczenie podatności par Coopera. Umożliwi to zweryfikowanie hipotezy dotyczącej występowania niekonwencjonalnego nadprzewodnictwa typu FFLO oraz zbadanie przejścia Lifszycza indukowanego ciśnieniem zewnętrznym. Dodatkowo zbadany zostanie wpływ zredukowanej wymiarowości na własności nadprzewodzące w cienkich warstwach FeSe. Kolejnym zadaniem będzie zbadanie własności strukturalnych, magnetycznych i dynamicznych

nanostruktur Fe-Si. Wyniki otrzymane metodami obliczeniowymi pozwolą wyznaczyć podstawowe wielkości termo-elastyczne tych materiałów i zinterpretować pomiary parcjalej fononowej gęstości stanów żelaza.