Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm w związkach *d*-elektronowych NiO, LaCoO₃, FeO, CoO

Prof. dr hab. R. J. Radwański

Centrum Fizyki Ciała Stałego, Kraków Instytut Fizyki, Uniwersytet Pedagogiczny, Kraków

seminarium WFiIS AGH, 11 marzec 2011, 12.15

向下 イヨト イヨト

Modne obecnie wszędzie, i w życiu codziennym "dążymy do prawdy".

Pomimo, że wiemy, że "Prawda Was wyzwoli" to ludzie starsi z większym doświadczeniem życiowym wiedzą, że więcej prawdy nie czyni człowieka szczęśliwszym.

Odkrywanie zamysłu Bożego.

- Ciekawi jesteśmy jak ten świat działa.
- Zauważmy, że fizycy są ludźmi bardzo wierzącymi wierzymy, że ten skomplikowany świat da się opisać w racjonalny sposób.

イロト イボト イヨト

3

Modne obecnie wszędzie, i w życiu codziennym "dążymy do prawdy".

Pomimo, że wiemy, że "Prawda Was wyzwoli" to ludzie starsi z większym doświadczeniem życiowym wiedzą, że więcej prawdy nie czyni człowieka szczęśliwszym.

Odkrywanie zamysłu Bożego.

- Ciekawi jesteśmy jak ten świat działa.
- Zauważmy, że fizycy są ludźmi bardzo wierzącymi wierzymy, że ten skomplikowany świat da się opisać w racjonalny sposób.

• □ ▶ • □ ▶ • □ ▶ • □ ▶ • □ ▶

Modne obecnie wszędzie, i w życiu codziennym "dążymy do prawdy".

Pomimo, że wiemy, że "Prawda Was wyzwoli" to ludzie starsi z większym doświadczeniem życiowym wiedzą, że więcej prawdy nie czyni człowieka szczęśliwszym.

Odkrywanie zamysłu Bożego.

- Ciekawi jesteśmy jak ten świat działa.
- Zauważmy, że fizycy są ludźmi bardzo wierzącymi wierzymy, że ten skomplikowany świat da się opisać w racjonalny sposób.

イロト 不得 トイヨト イヨト

Modne obecnie wszędzie, i w życiu codziennym "dążymy do prawdy".

Pomimo, że wiemy, że "Prawda Was wyzwoli" to ludzie starsi z większym doświadczeniem życiowym wiedzą, że więcej prawdy nie czyni człowieka szczęśliwszym.

Odkrywanie zamysłu Bożego.

- Ciekawi jesteśmy jak ten świat działa.
- Zauważmy, że fizycy są ludźmi bardzo wierzącymi wierzymy, że ten skomplikowany świat da się opisać w racjonalny sposób.

イロト 不得 トイヨト イヨト

Modne obecnie wszędzie, i w życiu codziennym "dążymy do prawdy".

Pomimo, że wiemy, że "Prawda Was wyzwoli" to ludzie starsi z większym doświadczeniem życiowym wiedzą, że więcej prawdy nie czyni człowieka szczęśliwszym.

Odkrywanie zamysłu Bożego.

- Ciekawi jesteśmy jak ten świat działa.
- Zauważmy, że fizycy są ludźmi bardzo wierzącymi wierzymy, że ten skomplikowany świat da się opisać w racjonalny sposób.

- Opis magnetycznych i elektronowych właściwości związków metali przejściowych (3d-/4f-/5f- open-shell atoms)
- Opis elektronów niezapełnionej powłoki 3d
- ▶ wędrowne (pasmowe, stany 3d ciągłe, ≈ 10 eV) np. Phys.
 Rev. B 61 (2000) 1324; Phys. Rev. Lett. 103 (2009) 036404.
- zlokalizowane znane jako stany pola krystalicznego, stany dyskretne, z szerokością < 1meV,

- Opis magnetycznych i elektronowych właściwości związków metali przejściowych (3d-/4f-/5f- open-shell atoms)
- Opis elektronów niezapełnionej powłoki 3d
- ▶ wędrowne (pasmowe, stany 3d ciągłe, ≈ 10 eV) np. Phys.
 Rev. B 61 (2000) 1324; Phys. Rev. Lett. 103 (2009) 036404.
- zlokalizowane znane jako stany pola krystalicznego, stany dyskretne, z szerokością < 1meV,

イロト イポト イヨト イヨト

- Opis magnetycznych i elektronowych właściwości związków metali przejściowych (3d-/4f-/5f- open-shell atoms)
- Opis elektronów niezapełnionej powłoki 3d
- ▶ wędrowne (pasmowe, stany 3d ciągłe, ≈ 10 eV) np. Phys.
 Rev. B 61 (2000) 1324; Phys. Rev. Lett. 103 (2009) 036404.
- zlokalizowane znane jako stany pola krystalicznego, stany dyskretne, z szerokością < 1meV,

イロト イポト イヨト イヨト 二日

- Opis magnetycznych i elektronowych właściwości związków metali przejściowych (3d-/4f-/5f- open-shell atoms)
- Opis elektronów niezapełnionej powłoki 3d
- ▶ wędrowne (pasmowe, stany 3d ciągłe, ≈ 10 eV) np. Phys.
 Rev. B 61 (2000) 1324; Phys. Rev. Lett. 103 (2009) 036404.
- zlokalizowane znane jako stany pola krystalicznego, stany dyskretne, z szerokością < 1meV,

Zlokalizowany opis elektronów niezapełnionej powłoki 3d

- Kwantowa Atomistyczna Teoria Ciała Stałego (QUASST) dyskretne, quasi-atomowe stany zachowują się w ciałach stałych zawierających atomy metali przejściowych.
- te dyskretne stany d elektronów znane jako stany pola krystalicznego
- pole krystaliczne (analiza struktury krystalograficznej, lokalnej symetrii..)
- sprzężenie spinowo-orbitalne
- ▶ S Y M E T R I A !!!

Zlokalizowany opis elektronów niezapełnionej powłoki 3d

- Kwantowa Atomistyczna Teoria Ciała Stałego (QUASST) dyskretne, quasi-atomowe stany zachowują się w ciałach stałych zawierających atomy metali przejściowych.
- te dyskretne stany d elektronów znane jako stany pola krystalicznego
- pole krystaliczne (analiza struktury krystalograficznej, lokalnej symetrii..)
- sprzężenie spinowo-orbitalne
- ▶ S Y M E T R I A !!!

Zlokalizowany opis elektronów niezapełnionej powłoki 3d

- Kwantowa Atomistyczna Teoria Ciała Stałego (QUASST) dyskretne, quasi-atomowe stany zachowują się w ciałach stałych zawierających atomy metali przejściowych.
- te dyskretne stany d elektronów znane jako stany pola krystalicznego
- pole krystaliczne (analiza struktury krystalograficznej, lokalnej symetrii..)
- sprzężenie spinowo-orbitalne
- ▶ S Y M E T R I A !!!

Zlokalizowany opis elektronów niezapełnionej powłoki 3d

- Kwantowa Atomistyczna Teoria Ciała Stałego (QUASST) dyskretne, quasi-atomowe stany zachowują się w ciałach stałych zawierających atomy metali przejściowych.
- te dyskretne stany d elektronów znane jako stany pola krystalicznego
- pole krystaliczne (analiza struktury krystalograficznej, lokalnej symetrii..)
- sprzężenie spinowo-orbitalne
- ▶ S Y M E T R I A !!!

Zlokalizowany opis elektronów niezapełnionej powłoki 3d

- Kwantowa Atomistyczna Teoria Ciała Stałego (QUASST) dyskretne, quasi-atomowe stany zachowują się w ciałach stałych zawierających atomy metali przejściowych.
- te dyskretne stany d elektronów znane jako stany pola krystalicznego
- pole krystaliczne (analiza struktury krystalograficznej, lokalnej symetrii..)
- sprzężenie spinowo-orbitalne
- SYMETRIA !!!

Recepie analizy właściwości związków wg QUASST

Analizę właściwości każdego związku zawierającego atomy metalu przejściowego 3*d*, 4*d*, 4*f*, 5*f* należy zaczynać od jak najlepszego opisu standardowych oddziaływań, w tym oddziaływania pola krystalicznego w krysztale i oddziaływania spin-orbita, oraz dokładną analizą symetrii struktury krystalograficznej danego związku.

Poprzedzone to jest analizą rozkładu ładunku elektrycznego w krysztale i określenia roli poszczególnych elektronów.

Cel główny:

prezentacja Kwantowej Atomistycznej Teorii Ciała Stałego (QUASST - Quantum Atomistic Solid State Theory) na przykładzie wybranych związków (NiO, FeO, CoO, LaCoO₃) wraz z prośbą o:

- 1. krytyczną naukową analizę i próby jej sfalsyfikowania
- prośba o pisemne analizy, najlepiej w ciągu miesiąca (email sfradwan@cyf-kr.edu.pl)

イロト イポト イヨト イヨト

QUASST to jest polska teoria (RJR, Centrum Fizyki Ciała Stałego w Krakowie), więc ...

- prośba o wsparcie naukowe. Będzie to jakimś dowodem, że Polacy coś potrafią razem zrobić.
- Fizyka ciała stałego jest bardzo witalną dziedziną fizyki. Ciągle odkrywane sa nowe związki o bardzo ciekawych własnościach. I właśnie te ciekawe własności umożliwiają zastosowania. Tylko dlatego, że dioda nie spełnia prawa Ohma ma zastosowanie w tranzystorze i w prostownikach.

(1日) (1日) (1日)

- QUASST to jest polska teoria (RJR, Centrum Fizyki Ciała Stałego w Krakowie), więc ...
- prośba o wsparcie naukowe. Będzie to jakimś dowodem, że Polacy coś potrafią razem zrobić.
- Fizyka ciała stałego jest bardzo witalną dziedziną fizyki. Ciągle odkrywane sa nowe związki o bardzo ciekawych własnościach. I właśnie te ciekawe własności umożliwiają zastosowania. Tylko dlatego, że dioda nie spełnia prawa Ohma ma zastosowanie w tranzystorze i w prostownikach.

- QUASST to jest polska teoria (RJR, Centrum Fizyki Ciała Stałego w Krakowie), więc ...
- prośba o wsparcie naukowe. Będzie to jakimś dowodem, że Polacy coś potrafią razem zrobić.
- Fizyka ciała stałego jest bardzo witalną dziedziną fizyki. Ciągle odkrywane sa nowe związki o bardzo ciekawych własnościach. I właśnie te ciekawe własności umożliwiają zastosowania. Tylko dlatego, że dioda nie spełnia prawa Ohma ma zastosowanie w tranzystorze i w prostownikach.

- Te ciekawe własności to np. w LaCoO₃ możliwość sterowania stanem magnetycznym (stan nisko- i wysoko-spinowy),
- badania Goodenough'a w USA były opłacane przez Naval Army.
- odkrycie nadprzewodnictwa wysoko-temperaturowego w materiałach tlenkowych (przed 1984 rokiem najwyższa temp. nadprzewodnictwa była dla związków metalicznych o strukturze A15 (Nb₃Sn 18K; Nb₃Ge 23.2 K; Nb₃Si 18; Nb₃Ga 20K; Nb₃Al 19K, V₃Si 17K))
- odkrycie nadprzewodnictwa w związkach żelaza pniktydki -FeSe, NaFeAs, BaFe₂As₂,
- Np. dyskutowany tu LaCoO₃ (i podobny LiCoO₂; baterie litowe) wykorzystywany jest do baterii elektrycznych zasilających nasze telefony komórkowe, komputery, itd.
- Czyli badania z fizyki ciała stałego mają cel zarówno poznawczy jak i wysoce praktyczny.

<ロ> (四) (四) (三) (三) (三)

- Te ciekawe własności to np. w LaCoO₃ możliwość sterowania stanem magnetycznym (stan nisko- i wysoko-spinowy),
- badania Goodenough'a w USA były opłacane przez Naval Army.
- odkrycie nadprzewodnictwa wysoko-temperaturowego w materiałach tlenkowych (przed 1984 rokiem najwyższa temp. nadprzewodnictwa była dla związków metalicznych o strukturze A15 (Nb₃Sn 18K; Nb₃Ge 23.2 K; Nb₃Si 18; Nb₃Ga 20K; Nb₃Al 19K, V₃Si 17K))
- odkrycie nadprzewodnictwa w związkach żelaza pniktydki -FeSe, NaFeAs, BaFe₂As₂,
- Np. dyskutowany tu LaCoO₃ (i podobny LiCoO₂; baterie litowe) wykorzystywany jest do baterii elektrycznych zasilających nasze telefony komórkowe, komputery, itd.
- Czyli badania z fizyki ciała stałego mają cel zarówno poznawczy jak i wysoce praktyczny.

イロト イヨト イヨト イヨト 三日

- Te ciekawe własności to np. w LaCoO₃ możliwość sterowania stanem magnetycznym (stan nisko- i wysoko-spinowy),
- badania Goodenough'a w USA były opłacane przez Naval Army.
- odkrycie nadprzewodnictwa wysoko-temperaturowego w materiałach tlenkowych (przed 1984 rokiem najwyższa temp. nadprzewodnictwa była dla związków metalicznych o strukturze A15 (Nb₃Sn 18K; Nb₃Ge 23.2 K; Nb₃Si 18; Nb₃Ga 20K; Nb₃Al 19K, V₃Si 17K))
- odkrycie nadprzewodnictwa w związkach żelaza pniktydki -FeSe, NaFeAs, BaFe₂As₂,
- Np. dyskutowany tu LaCoO₃ (i podobny LiCoO₂; baterie litowe) wykorzystywany jest do baterii elektrycznych zasilających nasze telefony komórkowe, komputery, itd.
- Czyli badania z fizyki ciała stałego mają cel zarówno poznawczy jak i wysoce praktyczny.

イロト イヨト イヨト イヨト 三日

- Te ciekawe własności to np. w LaCoO₃ możliwość sterowania stanem magnetycznym (stan nisko- i wysoko-spinowy),
- badania Goodenough'a w USA były opłacane przez Naval Army.
- odkrycie nadprzewodnictwa wysoko-temperaturowego w materiałach tlenkowych (przed 1984 rokiem najwyższa temp. nadprzewodnictwa była dla związków metalicznych o strukturze A15 (Nb₃Sn 18K; Nb₃Ge 23.2 K; Nb₃Si 18; Nb₃Ga 20K; Nb₃Al 19K, V₃Si 17K))
- odkrycie nadprzewodnictwa w związkach żelaza pniktydki -FeSe, NaFeAs, BaFe₂As₂,
- Np. dyskutowany tu LaCoO₃ (i podobny LiCoO₂; baterie litowe) wykorzystywany jest do baterii elektrycznych zasilających nasze telefony komórkowe, komputery, itd.
- Czyli badania z fizyki ciała stałego mają cel zarówno poznawczy jak i wysoce praktyczny.

イロト イヨト イヨト イヨト 三日

- Te ciekawe własności to np. w LaCoO₃ możliwość sterowania stanem magnetycznym (stan nisko- i wysoko-spinowy),
- badania Goodenough'a w USA były opłacane przez Naval Army.
- odkrycie nadprzewodnictwa wysoko-temperaturowego w materiałach tlenkowych (przed 1984 rokiem najwyższa temp. nadprzewodnictwa była dla związków metalicznych o strukturze A15 (Nb₃Sn 18K; Nb₃Ge 23.2 K; Nb₃Si 18; Nb₃Ga 20K; Nb₃Al 19K, V₃Si 17K))
- odkrycie nadprzewodnictwa w związkach żelaza pniktydki -FeSe, NaFeAs, BaFe₂As₂,
- Np. dyskutowany tu LaCoO₃ (i podobny LiCoO₂; baterie litowe) wykorzystywany jest do baterii elektrycznych zasilających nasze telefony komórkowe, komputery, itd.
- Czyli badania z fizyki ciała stałego mają cel zarówno poznawczy jak i wysoce praktyczny.

・ロト ・ 日 ・ ・ ヨ ・ ・ ヨ ・ ・ ヨ

- Te ciekawe własności to np. w LaCoO₃ możliwość sterowania stanem magnetycznym (stan nisko- i wysoko-spinowy),
- badania Goodenough'a w USA były opłacane przez Naval Army.
- odkrycie nadprzewodnictwa wysoko-temperaturowego w materiałach tlenkowych (przed 1984 rokiem najwyższa temp. nadprzewodnictwa była dla związków metalicznych o strukturze A15 (Nb₃Sn 18K; Nb₃Ge 23.2 K; Nb₃Si 18; Nb₃Ga 20K; Nb₃Al 19K, V₃Si 17K))
- odkrycie nadprzewodnictwa w związkach żelaza pniktydki -FeSe, NaFeAs, BaFe₂As₂,
- Np. dyskutowany tu LaCoO₃ (i podobny LiCoO₂; baterie litowe) wykorzystywany jest do baterii elektrycznych zasilających nasze telefony komórkowe, komputery, itd.
- Czyli badania z fizyki ciała stałego mają cel zarówno poznawczy jak i wysoce praktyczny.

・ロト ・回ト ・ヨト ・ヨト - ヨ

LaCoO₃ Izolator

 niemagnetyczny stan podstawowy,

- ▶ NiO AF, $T_N = 525$ K, izolator
- tlenki 3d: izolatory pomimo otwartej powłoki 3d.

- LaCoO₃ Izolator
- niemagnetyczny stan podstawowy,

- ▶ NiO AF, $T_N = 525$ K, izolator
- tlenki 3d: izolatory pomimo otwartej powłoki 3d.

- LaCoO₃ Izolator
- niemagnetyczny stan podstawowy,

- ► NiO AF, T_N = 525 K, izolator
- tlenki 3d: izolatory pomimo otwartej powłoki 3d.

- LaCoO₃ Izolator
- niemagnetyczny stan podstawowy,

- ► NiO AF, T_N = 525 K, izolator
- tlenki 3d: izolatory pomimo otwartej powłoki 3d.

・ 同 ト ・ ヨ ト ・ ヨ ト ・







10Dq is the t2g-eg splitting in the octahedral crystal field. - it defines the octupolar crystal-field interactions,

・ロト ・回ト ・ヨト ・ヨト



Acta Physica 1, 26 (2006); 1 eV = 11600 K; 1 meV=11.6 K; 1 K≊ 0.1 meV < □ + < □ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < ⊇ + < < = < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < < > < <

Prof. dr hab. R. J. Radwański Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm





QUASST (RJR): NiO

- Kwantowa Atomistyczna Teoria Ciała Stałego (QUASST) rozpoznaje, że silne korelacje elektronowe w NiO to głównie:
- 1. transfer ładunku (2 elektronów) od Ni do tlenu tworząc jony Ni²⁺ i O²⁻,
- 2. wewnątrz-atomowe korelacje pomiędzy elektronami w niezapełnionej powłoki 3d, które tworzą jon, tj. silnie skorelowany układ 3d⁸

QUASST (RJR): NiO

- Kwantowa Atomistyczna Teoria Ciała Stałego (QUASST) rozpoznaje, że silne korelacje elektronowe w NiO to głównie:
- 1. transfer ładunku (2 elektronów) od Ni do tlenu tworząc jony Ni²⁺ i O²⁻,
- 2. wewnątrz-atomowe korelacje pomiędzy elektronami w niezapełnionej powłoki 3d, które tworzą jon, tj. silnie skorelowany układ 3d⁸

W związkach metali przejściowych istnieje dyskretna struktura elektronowa związana z atomo-podobnymi stanami elektronowymi:

- określa w znacznym stopniu właściwości w niskich temperaturach, w 300 K i własności optyczne (1.6-3.7 eV);
- niskoenergetyczna struktura elektronowa < 1 meV;
- spójny opis stanu podstawowego i termodynamiki.

Opis jednoelektronowy nieoddziałujących elektronów (LDA) załamuje się - metal zamiast izolatora.



FIG. 1 (color online). Band structure of FeO in AF II phase obtained by plane-wave-pseudopotential calculations with the exact exchange and LDA correlation, utilizing the KLI approximation: Hard pseudopotential for iron with cutoff radii of $r_{c,s} = r_{c,p} = r_{c,d} = 0.8$ bohr and plane-wave cutoff energy of $E_{\rm cut} = 300$ Ry [11] (solid, black lines) versus soft pseudopotential with $r_{c,s} = 0.86$ bohr, $r_{c,p} = 1.0$ bohr, $r_{c,d} = 1.15$ bohr and $E_{\rm cut} = 160$ Ry (dashed, blue lines).

Engel@Schmid PRL 103, 036404 (2009)

Prof. dr hab. R. J. Radwański Dysk

Image: Image


Prof. dr hab. R. J. Radwański

Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

Opis jednoelektronowy nieoddziałujących elektronów załamuje się, bo są silne korelacje.

- W NiO istnieje dyskretna nisko-energetyczna struktura elektronowa (< 1 meV) związana z atomem Ni determinująca własności stanu podstawowego, przejście fazowe (paramagnetyk – AF), termodynamikę całego związku NiO.
- QUASST godzi magnetyzm i izolacyjny stan podstawowy tlenków 3d,
- Spinowe i orbitalne stopnie swobody są związane (splątane, quantum entanglement)
- Moment orbitalny w NiO jest fundamentalnie istotny

RJR

- Moment orbitalny w związkach z atomami (jonami) 3d musi być "odmrożony" ("unqueched").
- teorie, które nie uwzględniają silnych korelacji i orbitalnego magnetyzmu są bezwartościowe

Dyskusja o NiO

- Obecna dyskusja o NiO: Mattila *et al.* w Phys.Rev.Lett. 98, 196404(2007) założył 10*Dq* jako 0.3 eV. Nasz Comment do PRL - LCK 1051 (6 March 2009)
- Soriano et al. w Phys. Rev. B 75, 233417 (2007) założył 10Dq tylko 0.1 eV Nasz Comment do PRB - BTK 1007 (6 June 2008)
- Taguchi *et al.* w Phys. Rev. Lett. 100, 206401 (2008) używa wartości 10*Dq* jako 0.3 eV. Nasz Comment do PRL - LUK 1036 (22 July 2008)

Brak teoretycznego consensusu w opisie NiO w bieżącej literaturze.

Twierdzę, że te wartości są za małe i powinny wynosić 1.1 eV (1.08 eV).

Wartość momentu oktupolowego 10*Dq* można policzyć z really first-principles calculations (typu point-charge model)

ヘロト ヘヨト ヘヨト



A Tanabe-Sugano diagram for the Fe^{2+} -ion (3d⁶ configuration) showing the influence of the octahedral crystal field on the electronic terms of the free Fe^{2+} -ion. The electronic structure of cubic subterms, corresponding to 10Dq of 1.29 eV, is relevant to FeO. efekt Starka dla atomu Felll (Fe²⁺) RJR, ZR, Acta Physica 4 (2007) 1

伺 ト イヨト イヨト

www.actaphysica.eu



Calculated phenomena related to the formation of (antiferro-)magnetic state of FeO at T_N of 191 K.

a) the splitting of the three lowest states of the ${}^{5}T_{2g}$ subterm below T_{N} ; the moment of the ground state of 4.88 μ_{B} is built up from the spin moment of 3.86 μ_{B} and the orbital moment of 1.02 μ_{B} ;

b) the splitting in the paramagnetic state is due to the trigonal distortion; Calculated Fe²⁺ ion contribution to the heat capacity of FeO, the lattice contribution is described by the Debye temperature Θ_D of 650 K; experimental data from Stolen*et al.*, Amer. Mineral. 81 (1996) 973;

c) Temperature dependence of the magnetic moment of the Fe²⁺ ion in FeO. **efekt** Zeemanna dla atomu FeIII (Fe²⁺)

・ロト ・回ト ・ヨト ・ヨト

	Exper	iment	Our calculations									
	structure		Tu ^{cal} (K)	m. (11-)	direction							
	distortion			mtot (PB)								
FeO	NaCl	101	101	1 99	∏diag.							
	trigonal		191	4.00								
CoO	NaCl	201	201	4.02	\perp tetrag.							
	tetragonal	7 291	291	4.02								
NiO	NaCl	525	525	2.45	\perp diag.							
	trigonal	525	525	2.45								
	$\Delta_{ ext{CF}}$ (eV)	ground subterm	\langle r 4 \rangle (a $_B{}^4)$	m _s (µ _B)	m _o (μ _B)							
FeO	1.29	⁵ T _{2g} (15)	14.8	3.86	1.02							
CoO	1.19	⁴ T _{1g} (12)	12.6	2.99	1.03							
NiO	1.08	³ A _{2g} (3)	10.5	1.99	0.46							

◆□ > ◆□ > ◆ 三 > ◆ 三 > ・ 三 ・ の へ ()・



Prof. dr hab. R. J. Radwański

Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

LaCoO₃ Phys. Rev. B 67 (2003) 172401



イロト イヨト イヨト イヨト

臣





・ロト ・回ト ・ヨト ・ヨト

臣

Z. Ropka, R. J. Radwanski Phys.Rev. B 67, 172401 (2003)







Exp. EPR on single crystal, different directions, excited states Noguchi et al. Phys. Rev. B **66** (2002) 094404

イロン 不同 とくほど 不同 とう

э

Our theoretical explanation Z. Ropka, R. J. Radwanski Phys. Rev. B **67** (2003) 172401

Prof. dr hab. R. J. Radwański Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

Diamagnetic to paramagnetic transition in LaCoO₃

M. J. R. Hoch,1 S. Nellutla,1 J. van Tol,1 Eun Sang Choi,1 Jun Lu,1 H. Zheng,2 and J. F. Mitchell2

¹National High Magnetic Field Laboratory, Florida State University, Tallahaxsee, Florida 32310, USA ²Materials Science Division, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois 60439, USA (Received 10 December 2008; revised amanscript received 19 May 2009; published 16 June 2009)

The dimagnetic to paramagnetic significant consistent in LGCO₃ (LGCO) that cocers in the temperature maps 0.512 KK spectrally attributed to the small energy gap between 66 Cr₂ s₂ and e_{γ} tarks. To bettere for this thermally activated transition has been interpreted as isolating to either the intermediate spin state, $P_{\alpha}^{-1}(S^{-1})$, the answer of the state properties of this system, we have made measurements of both the magnetization in applied fields of up to 31 and the specific base is convisionif description spin state of the state of the

DOI: 10.1103/PhysRevB.79.214421

PACS number(s): 75.20.Ck, 75.30.Cr, 76.30.-v

I. INTRODUCTION

The Co ion in LaCoO₂ (LCO) exists in a diamagnetic low spin (LS) S=0 state at low temperatures (T < 20 K) and in higher spin states for T>80 K. The nature of the spin state transition that occurs in the range from 30 to 120 K has been the subject of considerable interest and debate.1-15 The hybridized electron orbitals that are of importance in determining the magnetic properties of the octahedrally coordinated $3d^6$ Co ion are the t_2 , and e_2 orbitals. The small activation energy of 15 meV between t2, and e, states in LCO is attributed to competition between the intraionic Hund's rule coupling and the crystal-field splitting. The configuration of the Co3+ ion involves six electrons and at low temperatures the LS configuration is $t_{2a}^6 e_a^0$ while at higher temperatures electrons are excited into the e, levels. It has been suggested that the thermally induced spin state found above 80 K is either the intermediate spin (IS) state, S=1 ($t_{2,v}^5e_v^1$), or, alternatively, the high-spin (HS) state S=2 $(r_{2,e}^4 e_a^2)$.

In terms of a single-ion type description the formation of an effective S=1 state can be understood using a Hamiltonian that allows for crystal-field (CF) splitting, spin-orbit coupling, and a small zero-field splitting. This form is supported by the electron paramagnetic resonance (EPR) results of Noguchi et al.16 and the theoretical treatment of Ropka and Radwanski,17 The d-d Coulomb interaction results in a ⁵D term (25-fold degenerate) which under the effect of the octahedral CF splits into a 15-fold degenerate cubic subterm ⁵T₂, and a 10-fold degenerate ⁵E, subterm at higher energy, The spin-orbit interaction further splits the ${}^{5}T_{2}$, manifold into a triplet, a quintet and a septet with the triplet as the lowest of these levels. If we represent the effective angular momentum by S, then the small trigonal distortion from cubic to rhombohedral symmetry in LCO splits the S=1 triplet into a singlet and a doublet separated by D, the zero-field splitting. Furthermore, in this description the lowtemperature LS state is the 1A1 state of the Co3+ free-ion 1/ term, which becomes the ground state as a result of CF interactions.¹⁷ A representation of the ground state, the low-lying triplet, and quinter states in zero magnetic field are shown in Fig. 1(a). Figure 11(b) shows the ground state and the triplet state (S=1) as a function of applied field. It is interesting to note the possibility that triplet-singlet level crossing may be induced by an applied field of \sim 70 to 80 T dependant on crystal orientation.

Using parameters derived from the EPR results, a theoretical fit to the measured magnetic-suscentibility data has been found to give the correct form but with values that are a factor three too large.16 An improved fit is obtained using g =2.16 It is possible that changes in the electronic configuration may occur as the nonulation of the e-states is increased. due to the enhanced hybridization effects with the O 2n orbitals leading to a change in g. In this connection it is interesting to note that recent high-temperature EPR spectra obtained at X-band for a series of polycrystalline Sr-doned cobaltites La. Sr.CoO₅ (LSCO) (x=0.1, 0.2, and 0.3), in which the double exchange and local Jahn-Teller distortions lead to changes in the electronic ground state of the Co ions. give $g \sim 2.18$ The difference in g values for the undoped and hole-doned crystals has been attributed to the changes in the electronic configuration that lead to the stabilization of an S=1 ground state in even lightly doped (x > 1%) LSCO, with concomitant changes from atomic-like states to band states but this is not firmly established.19

The present work on a single-crystal sample of LCO combines several experimental measurements with a neura-field model in an effort to obtain a consistent description of the spin state transition at temperatures below 200 K. Our staduies include continuous-wave (cw) EPR measurements in the friopency range 240-406 GHz at temperatures 4-70 K, magnetization measurements up to 200 K in high magnetic magnetization measurements up to 200 K in high magnetic transmission of the temperature of the temperatures of the T. The EPR measurements in sweepful fields up to 127 complement the previous pulsed-field work¹⁰ and address.

1098-0121/2009/79(21)/214421(7)

214421-1

Prof. dr hab. R. J. Radwański

PHYSICAL REVIEW B 79, 214421 (2009)

Diamagnetic to paramagnetic transition in LaCoO₃

M. J. R. Hoch,¹ S. Nellutla,¹ J. van Tol,¹ Eun Sang Choi,¹ Jun Lu,¹ H. Zheng,² and J. F. Mitchell² ¹National High Magnetic Field Laboratory, Florida State University, Tallahassee, Florida 32310, USA ²Materials Science Division, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois 60439, USA (Received 10 December 2008; revised manuscript received 19 May 2009; published 16 June 2009)

> T and the specific heat at 0 and 9 T on a single crystal of LCO. In addition, EPR measurements were made on the same sample using high-field EPR spectrometers. The spin-Handiltonian parameters are consistent with the pervious pulsed-field EPR work and support the atomic-like energy level description of the Co ion. The

In terms of a single-ion type description the formation of an effective S=1 state can be understood using a Hamiltonian that allows for crystal-field (CF) splitting, spin-orbit coupling, and a small zero-field splitting. This form is supported by the electron paramagnetic resonance (EPR) results of Noguchi et al.¹⁶ and the theoretical treatment of Ropka and Radwanski.¹⁷ The *d-d* Coulomb interaction results in a ^{5}D term (25-fold degenerate) which under the effect of the octahedral CF splits into a 15-fold degenerate cubic subterm ${}^{5}T_{2a}$ and a 10-fold degenerate ${}^{5}E_{a}$ subterm at higher energy. The spin-orbit interaction further splits the ${}^{5}T_{2a}$ manifold into a triplet, a quintet and a septet with the triplet as the lowest of these levels. If we represent the effective angular momentum by S, then the small trigonal distortion from cubic to rhombohedral symmetry in LCO splits the S=1 triplet into a singlet and a doublet separated by D, the zero-field splitting. Furthermore, in this description the lowtemperature LS state is the ${}^{1}A_{1}$ state of the Co³⁺ free-ion ${}^{1}I$ teraction further splits the $5T_{22}$ manifold a quintet and a septet with the triplet as the st of these levels. If we represent the effective angular frequency range 240-406 GHz entum by S, then the small trigonal distortion from cuto rhombohedral symmetry in LCO splits the S=1 triplet a singlet and a doublet separated by D, the zero-field tting. Furthermore, in this description the lowthe previous pulsed-field work16 and address, perature LS state is the 1A1 state of the Co3+ free-ion a, the question of a possible decrease in a factor with

1098-0121/2009/79(21)/214421(7)

214421-

2009 The American Physical Socie

Prof. dr hab. R. J. Radwański

Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

- Do opisu ciała stałego zawierającego atomy metali przejściowych niezbędna jest wiedza z fizyki atomowej, mechaniki kwantowej, fizyki statystycznej.
- Magnetyzm jest kwantowym efektem w skali makroskopowej; jest wynikiem złamania symetrii odwrócenia czasu (time-reversal symmetry breaking).
- Jest coraz więcej faktów exp. potwierdzających, że atomy w ciele stałym zachowują więcej swojej atomowej integralności niż dotychczas uważano – coraz częściej odkrywa się nisko-energetyczną strukturę elektronową w skali < 1 meV w zarówno w związkach jonowych jak i metalicznych (ErNi₅).



Prof. dr hab. R. J. Radwański

Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

Analizy powyższych związków to piękne przykłady do konkretnych obliczeń

- z mechaniki kwantowej (funkcje własne, diagonalizacja macierzy oddziaływań >50x50, obliczania różnych wartości oczekiwanych,)
- termodynamiki
 (przejścia fazowe, pik λ w c(T),)
- fizyki statystycznej (funkcja rozdziału, statystyki, populacje stanów, entropia, ciepło, podatność magnetyczna,)

イロト 不得 トイラト イラト 二日



Prof. dr hab. R. J. Radwański Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

Wnioski cd.

- Opracowana przez nas Kwantowa Atomistyczna Teoria Ciała Stałego rozpoznaje, że silne korelacje elektronowe są w głównej mierze wewnątrz-atomowymi korelacjami pomiędzy elektronami w niezapełnionej powłoce 3*d*, 4*f*, 5*f*.
 opis jednoelektronowy nieoddziałujących elektronów załamuje się.
- Własności NiO zostały spójnie wyjaśnione z innymi tlenkami 3d biorąc uwzględniając silne korelacje elektronowe i silną hybrydyzację,
- W związkach (3d/4f/5f) istnieje dyskretna nisko-energetyczna struktura electronowa (< 1 meV) odpowiedzialna za odstępstwa od prawa Curie-Weissa (χ(T)), anomalne ciepło właściwe, wiele innych egzotycznych zjawisk.
- Quantum Atomistic Solid State theory (QUASST) godzi magnetyzm i izolacyjny stan podstawowy tlenków 3d,

Dla moich doktorantów i współpracowników QUASST jest oczywistą oczywistością...

・日・ ・ ヨ・ ・ ヨ・

Dla moich doktorantów i współpracowników QUASST jest oczywistą oczywistością... ale ...

・日・ ・ ヨ・ ・ ヨ・

Dla moich doktorantów i współpracowników QUASST jest oczywistą oczywistością... ale ... są zniesmaczeni i zdegustowani sposobem uprawiania nauki w Polsce.

• • = • • = •

Dla moich doktorantów i współpracowników QUASST jest oczywistą oczywistością... ale ... są zniesmaczeni i zdegustowani sposobem uprawiania nauki w Polsce.

Uważamy, że opisaliśmy bardzo dużo różnych związków, w bardzo konkretny i spójny sposób. Chyba najwięcej, że wszystkich grup, nawet w skali światowej. Moment orbitalny w związkach z atomami (jonami) 3*d* musi być "odmrożony" ("unqueched").

向下 イヨト イヨト

Szczególne podziękowania dla pani dr Zosi Ropka

doktorat z wyróżnieniem na WFiJ AGH (2001)

Prof. dr hab. R. J. Radwański Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

Dziękuję za uwagę

Prof. dr hab. R. J. Radwański Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

回 とう モン・ モン

Nad czym pracujemy obecnie???

Prof. dr hab. R. J. Radwański Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

- 4 ⊒ ▶

OFE - bo któż lepiej potrafi liczyć niż fizyk!?

Prof. dr hab. R. J. Radwański Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

ING 🄊 OFE - stopa zwrotu 2007-2010 tylko 2.9%

ING OTWARTY FUNDUSZ EMERYTALNY DIaczego nikt o tym nie pisze ! ??? Czy OFE to WIELKIE OSZUSTWO ???

Informujemy, że ostatnia stopa zwrotu podana przez organ nadzoru do publicznej wiadomości, osiągnięta przez nasz otwarty fundusz emerytalny za okres 36 miesięcy (od 30.03.2007r. do 31.03.2010r.) wyniosła 2.317 %, podczas gdy średnia ważona stopa zwrotu wszystkich otwartych funduszy emerytalnych w tym okresie wyniosła 2.901 %.

Informacja o środkach znajdujących się na rachunku członka ING Otwartego Funduszu Emerytalnego

Imiona i nazwisko członka funduszu: Data urodzenia: Numer PESEL: Numer NIP: Seria i numer dowodu osobistego lub paszportu: Adres miejsca zamieszkania:

Numer rachunku członka funduszu:



Prof. dr hab. R. J. Radwański

Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

・ 同 ト ・ ヨ ト ・ ヨ

Stan rachunku w dniu 21.09.2010r., tj. dniu sporządzenia informacji:

- liczba zgromadzonych jednostek rozrachunkowych*: 1951.5317
- wartość jednostki rozrachunkowej*: 31.72 zł
- łączna wartość jednostek rozrachunkowych na rachunku*: 61902.59 zł

Informujemy, że ostatnia stopa zwrotu podana przez organ nadzoru do publicznej wiadomości, osiągnięta przez nasz otwarty fundusz emerytalny za okres 36 miesięcy (od 30.03.2007r. do 31.03.2010r.) wyniosła 2.317 %, podczas gdy średnia ważona stopa zwrotu wszystkich otwartych funduszy emerytalnych w tym okresie wyniosła 2.901 %.

Informujemy, że nasz otwarty fundusz emerytalny osiągnął następującą stopę zwrotu za okres:

- 12 miesięcy (od 30.06.2009r. do 30.06.2010r.) 13.426 %
- 60 miesiecy (od 30.06.2005r. do 30.06.2010r.) 32.688 %.

Wyniki zostały obliczone w ostatnim dniu roboczym kwartału poprzedzającego kwartał, w którym informacja została sporządzona.

W przypadku uznania, że otrzymana informacja o środkach znajdujących się na rachunku zawiera blędne dane, należy skontaktować się z naszym otwartym funduszem emerytalnym:

- pisemnie pod adresem: ING Otwarty Fundusz Emerytalny, 00-406 Warszawa, ul. Ludna 2 lub
- faksem pod numerem: (022) 522 11 11 lub
- przez internet pod adresem: www.ing.pl (info@ing.pl) lub
- telefonicznie pod numerem: 0 801 20 30 40 lub 22 522 71 24 (z telefonu komórkowego).

Informacja nieobligatoryjna

*oodano wartości obowiazujace w dniu roboczym poprzedzającym dzień sporządzenia informacji, jako ostatnie wartości dostępne w

Nad czym pracujemy obecnie? FeSi i FeSb₂ -

własności podobne do LaCoO₃

Prof. dr hab. R. J. Radwański Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

4回り イヨト イヨト



◆□ > ◆□ > ◆臣 > ◆臣 > ○

æ



R. J. Radwanski, Z Ropka

< ロ > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 >

æ

Lista związków opracowanych przez RJR i współpracowników

Prof. dr hab. R. J. Radwański Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

```
\begin{array}{l} {\sf metaliczne-Ho^{3+}\ w\ Ho_2Co_{17};} \\ {\sf Er^{3+}\ w\ ErNi_5;\ Nd^{3+}\ w\ NdAl_2\ i\ Nd_2Fe_{14}B;} \\ {\sf Pr^{3+}\ w\ PrAl_2\ i\ Pr_2Fe_{14}B;} \\ {\sf Dy^{3+}\ w\ DyNi_5} \end{array}
```

```
\mathsf{U}^{3+} w \mathsf{UPd}_2\mathsf{AI}_3 i \mathsf{UGa}_2; ..... \mathsf{Yb}^{3+} w \mathsf{YbRh}_2\mathsf{Si}_2, ......
```

```
jonowe - Co^{3+} w LaCoO<sub>3</sub>,
Ni<sup>2+</sup> w NiO; Co<sup>2+</sup> w CoO,
Fe<sup>2+</sup> w FeBr<sub>2</sub> i w FeO;
Pr<sup>3+</sup> w PrO<sub>2</sub> ......
```

	magn. atom	T_c, T_N (K)	Total ordered	Spin moment	Orbital moment		Quantum numbers			ms
	utom	(11)	moment	(µ _B)	(µ _B)		J	L	S	
Ho ₂ Co ₁₇	Но	1100	10.0			$4f^{10}$	8	6	2	
$Nd_2Fe_{14}B$	Nd	520	3.0	- 1.58	+3.68	$4f^3$	9/2	6	3/2	
$Pr_2Fe_{14}B$	Pr	520	3.0	0	0	$4f^2$	4	5	1	
ErNi ₅	Er	9	8.50	+ 2.83	+5.67	$4f^{11}$	15/2	6	3/2	
NdNi ₅	Nd	7	2.10	- 1.58	+3.68	$4f^3$	9/2	6	3/2	
PrNi ₅	Pr	0	0	0	0	$4f^2$	4	5	1	
PrRu ₂ Si ₂	Pr	14	2.68	- 0.54	+3.22	$4f^2$	4	5	1	
$ErRu_2Si_2$	Er	6	7.30	+ 2.45	+4.85	4f 11	15/2	6	3/2	
UPd ₂ Al ₃	U	14	1.40	- 1.05	+2.45	5f ³	9/2	6	3/2	
UGa ₂	U	125	2.80	- 2.10	+4.90	5f ³	9/2	6	3/2	
NpGa ₂	Np	55	2.39	- 3.20	+5.59	5f ⁴	4	6	2	
NiO	Ni	625	2.53	+ 1.99	+0.54	3d ⁸	-	3	1	2
FeBr ₂	Fe	14	4.32	+3.52	+0.80	3d ⁶	-	2	2	4
FeO	Fe	200	4.6	+3.70	+0.90	3d ⁶	-	2	2	4
FeS	Fe	598	5.0	+ 3.94	+1.06	3d ⁶	-	2	2	4
LaCoO ₃	Co	0	0.0	+4.00	-4.00	$3d^6$	-	2	2	4
LaMnO ₃	Mn	140	4.0	+ 3.95	+0.05	$3d^4$	-	2	2	4
MgV_2O_5	V	0	0.0	+1.00	-1.00	$3d^1$	-	2	1/2	1

◆□ > ◆□ > ◆ 三 > ◆ 三 > ・ 三 ・ の へ ()・

NiO i (GaMn)N

W moich długoletnich badaniach związków zawierających atomy 3d-/4f-/5f podkreślam ważność lokalnych efektów (local atomic-scale effects)

- 1. Pole krystaliczne
- 2. Oddziaływanie Spin-orbita
- 3. Lokalna symetria

NiO





QUANTUM ATOMISTIC SOLID STATE THEORY for LaCoO₃

- Dla LaCoO₃ jonowy rozkład ładunku: La³⁺ Co³⁺ O₃²⁻ tworzony jest w czasie formowania związku
- Wyjaśnienie stanu izolatora (niezależnie np. od dystorsji czy stanu AF).
- stan niemagnetyczny LaCoO₃ wynika z niemagnetycznego stanu w skali atomowej jonu Co³⁺

イロン イヨン イヨン ・
QUANTUM ATOMISTIC SOLID STATE THEORY for LaCoO₃

- Dla LaCoO₃ jonowy rozkład ładunku: La³⁺ Co³⁺ O₃²⁻ tworzony jest w czasie formowania związku
- Wyjaśnienie stanu izolatora (niezależnie np. od dystorsji czy stanu AF).
- stan niemagnetyczny LaCoO₃ wynika z niemagnetycznego stanu w skali atomowej jonu Co³⁺

イロト イポト イヨト イヨト

- Dla LaCoO₃ jonowy rozkład ładunku: La³⁺ Co³⁺ O₃²⁻ tworzony jest w czasie formowania związku
- Wyjaśnienie stanu izolatora (niezależnie np. od dystorsji czy stanu AF).
- stan niemagnetyczny LaCoO₃ wynika z niemagnetycznego stanu w skali atomowej jonu Co³⁺

・ 何 ト ・ ヨ ト ・ ヨ ト

- Odkrycie dyskretnej struktury elektronowej w LaCoO₃ (2002) i wyjaśnienie;
- Przyznanie poprawności stanu podstawowego LaMnO₃ obliczonego przez RJR w 1997/2002 przez Prof. A. M. Olesia (IF UJ) (2005);
- Odkrycie w 1996-2002 przez F. Steglicha stanów p.kryst. w ciężko-fermionowym związku UPd₂Al₃,
- Odkrycie w 2003-2004 przez F. Steglicha zlokalizowanego stanu p.kryst. w ciężko-fermionowym związku YbRh₂Si₂, i szereg innych.

- Odkrycie dyskretnej struktury elektronowej w LaCoO₃ (2002) i wyjaśnienie;
- Przyznanie poprawności stanu podstawowego LaMnO₃ obliczonego przez RJR w 1997/2002 przez Prof. A. M. Olesia (IF UJ) (2005);
- Odkrycie w 1996-2002 przez F. Steglicha stanów p.kryst. w ciężko-fermionowym związku UPd₂Al₃,
- Odkrycie w 2003-2004 przez F. Steglicha zlokalizowanego stanu p.kryst. w ciężko-fermionowym związku YbRh₂Si₂, i szereg innych.

- Odkrycie dyskretnej struktury elektronowej w LaCoO₃ (2002) i wyjaśnienie;
- Przyznanie poprawności stanu podstawowego LaMnO₃ obliczonego przez RJR w 1997/2002 przez Prof. A. M. Olesia (IF UJ) (2005);
- Odkrycie w 1996-2002 przez F. Steglicha stanów p.kryst. w ciężko-fermionowym związku UPd₂Al₃,
- Odkrycie w 2003-2004 przez F. Steglicha zlokalizowanego stanu p.kryst. w ciężko-fermionowym związku YbRh₂Si₂, i szereg innych.

イロト イポト イヨト イヨト

- Odkrycie dyskretnej struktury elektronowej w LaCoO₃ (2002) i wyjaśnienie;
- Przyznanie poprawności stanu podstawowego LaMnO₃ obliczonego przez RJR w 1997/2002 przez Prof. A. M. Olesia (IF UJ) (2005);
- Odkrycie w 1996-2002 przez F. Steglicha stanów p.kryst. w ciężko-fermionowym związku UPd₂Al₃,
- Odkrycie w 2003-2004 przez F. Steglicha zlokalizowanego stanu p.kryst. w ciężko-fermionowym związku YbRh₂Si₂, i szereg innych.

(1) マント (1) マント

W QUASST zakładamy, że atomy/jony zachowują w dużym stopniu swoją integralność stając się częścią ciała stałego. W LaMnO₃ integralność La³⁺([⁵⁴Xe]);Mn³⁺(¹⁸Ar 3d⁴) O²⁻ (2p⁶)

- Magnetyzm LaMnO₃ związany z Mn³⁺. Podobnie np. magnetyzm CoO Co²⁺, NiO Ni²⁺ LaCoO₃ Co³⁺ (6 elektronów d)
- LaMnO₃- opis atomo-podobnych stanów Mn³⁺ w krystalograficznej strukturze.
- "Hall-mark" QUASST jest używanie jonowej notacji dla jonowych i metalicznych związków: metaliczne - Ho³⁺ w Ho₂Co₁₇; Er³⁺ w ErNi₅; U³⁺ w UPd₂Al₃; Yb³⁺ w YbRh₂Si₂, jonowe - Co³⁺ w LaCoO₃, Ni²⁺ w NiO; Co²⁺ w CoO, Fe²⁺ w FeBI i w FeO: i wiele wiele innych

イロト イポト イヨト イヨト 二日

W QUASST zakładamy, że atomy/jony zachowują w dużym stopniu swoją integralność stając się częścią ciała stałego. W LaMnO₃ integralność La³⁺([⁵⁴Xe]);Mn³⁺(¹⁸Ar 3d⁴) O²⁻ (2p⁶)

- Magnetyzm LaMnO₃ związany z Mn³⁺. Podobnie np. magnetyzm CoO Co²⁺, NiO Ni²⁺ LaCoO₃ Co³⁺ (6 elektronów d)
- LaMnO₃- opis atomo-podobnych stanów Mn³⁺ w krystalograficznej strukturze.
- "Hall-mark" QUASST jest używanie jonowej notacji dla jonowych i metalicznych związków: metaliczne - Ho³⁺ w Ho₂Co₁₇; Er³⁺ w ErNi₅; U³⁺ w UPd₂Al₃; Yb³⁺ w YbRh₂Si₂, jonowe - Co³⁺ w LaCoO₃, Ni²⁺ w NiO; Co²⁺ w CoO, Fe²⁺ w FeBry i w FeO: i wiele, wiele innych.

W QUASST zakładamy, że atomy/jony zachowują w dużym stopniu swoją integralność stając się częścią ciała stałego. W LaMnO₃ integralność La³⁺([⁵⁴Xe]);Mn³⁺(¹⁸Ar 3d⁴) O²⁻ (2p⁶)

- Magnetyzm LaMnO₃ związany z Mn³⁺. Podobnie np. magnetyzm CoO Co²⁺, NiO Ni²⁺ LaCoO₃ Co³⁺ (6 elektronów d)
- LaMnO₃- opis atomo-podobnych stanów Mn³⁺ w krystalograficznej strukturze.
- "Hall-mark" QUASST jest używanie jonowej notacji dla jonowych i metalicznych związków: metaliczne - Ho³⁺ w Ho₂Co₁₇; Er³⁺ w ErNi₅; U³⁺ w UPd₂Al₃; Yb³⁺ w YbRh₂Si₂, jonowe - Co³⁺ w LaCoO₃, Ni²⁺ w NiO; Co²⁺ w CoO, Fe²⁺ w FeBr₂ i w FeO; i wiele, wiele innych.





Projekt realizowany w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka współfnansowany przez Unię Europejską z Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego

BADANIE UKŁADÓW W SKALI ATOMOWEJ NAUKI ŚCISŁE DLA INNOWACYJNEJ GOSPODARKI



- wzrost konkurencyjności w obszarach INFO, TECHNO, BIO
- rozwój badań innowacyjnych o charakterze aplikacyjnym
- nowe zespoły laboratoriów:
 - Zaawansowanych Materiałów
 - Nanotechnologii i Nauki o Powierzchni
 - Zastosowań Biomedycznych Fizyki i Chemii
 - Fotoniki, Spektroskopii i Laserowych Technologii Kwantowych
 - Centrum Zaawansowanych Technologii Obliczeniowych







Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej

Wydział Chemii



www.if.uj.edu.pl/ATOMIN

Prof. dr hab. R. J. Radwański



Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

イロト イヨト イヨト イヨト



Goście mile widziani !

Prof. dr hab. R. J. Radwański

Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm



SEMINARIUM POŁĄCZONYCH ZESPOŁÓW

AKADEMI GÖRNCZO-HUTNICZEJ. NSTYTUTU FIZYKI JADROWEJ. NSTYTUTU.FIZYKI POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ. NSTYTUTU FIZYKI UNWERSYTETU JAGELLONSKIEGO

z zakresu Fizyki Ciała Stałego odbędzie się w środę $5\overline{\times 1}$ 1997 r., o godz. 8:45 w Instytucie Fizyki UJ, ul. Reymonta 4, sala 328



Prof. R. J. Radwański Institut Fizuki WSP, Controm Fizuki Ciala Stalego, Kraków

"EFEKTY RELATYWISTYCZNE W STRUKTURZE ELEKTRONOWEJ ZWIĄZKÓW TLENOWYCH 3ď

Goście mile widziani

SEMINARIUM Fizyki Ciała Stałego

SEMINARIUM POŁĄCZONYCH ZESPOŁÓW

Akademii Górniczo-Hutniczej, Instytutu Fizyki Jądrowej, Instytutu Fizyki Politechniki Krakowskiej, Instytutu Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego

z zakresu Fizyki Ciała Stałego odbędzie się

w środę 17 stycznia 2001 r., o godz. 8⁴⁵ w Instytucie Fizyki UJ, ul. Reymonta 4, sala 057

z referatem:

Dr hab. R. J. RADWAŃSKI Instytut Fizyki Akademii Pedagogicznej w Krakowie oraz Centrum Fizyki Ctała Stałego w Krakowie

"UNIFIKACJA OPISU JONÓW 3d i 4f ORAZ WŁASNOŚCI ICH ZWIĄZKÓW"



"Fizyka silnie skorelowanych systemów elektronowych"

Prof. dr hab.Ryszard Radwański Zakład Fizyki Teoretycznej AP

Seminarium odbędzie się dn. 9 maja 2005 (poniedziałek) o godz. 13.30-15.00 w sali 417

Zapraszamy wszystkich zainteresowanych

.

Seminarium Zakładu Teorii Materii Skondensowanej

zapraszamy na kolejne spotkanie

w poniedziałek , 22.05.1995, o godz. 9⁸⁰ w sali nr 450 Instytutu Fizyki UJ ul. Reymonta 4, Kraków

Referat pt.

Fizyka układów ciężkofermionowych

wygłosi

Prof. dr hab. Ryszard Radwański

Instytut Fizyki i Informatyki WSP

Prof. dr hab. R. J. Radwański

Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm

Temperature-dependent correlations in covalent insulators: Dynamical mean-field approximation

J. Kuneš^{1,9} and V. L. Anisimov²

¹Theoretical Physics III, Conter for Electronic Correlations and Magnetism, Institute of Physics, University of Augsburg, Augsburg 60135, Germany ²Institute of Metal Physics, Russian Acadomy of Sciences-Iral Division, 6200H Delaterinburg GSP-170, Russia (Received 16 June 2008), publicled 25 July 2008)

Motivately phe peculiar behavior of FoSi and FoSib, we taudy the effect of Rocal electronic correlations on appendix, transport, and optical poperties in a sequelicity per of human fundame, mandy a contacti insulator. Investigating a minimum model of overlated insulator while a single-site dynamical insulator. The set and the to obtain the consource from the sensemparture manangued insulator is high-ensemptiane paramagnetic and a set of the software the sense model on the sense set of the sense of the sense of the sense of the sense model and the sense insulator is provided and the sense of the sense in t

DOI: 10.1103/PhysRevB.78.033109

PACS number(s): 71.27.+a, 71.10.-w

The effect of local electronic correlations turning metals into Mott insulators has been one of the major themes of condensed-matter theory. Electronic correlations in band insulators have received much less attention and were largely limited to investigation of Kondo insulators (KI) described by the periodic Anderson model at half filling. The possibility of a transition from a band insulator (BI) to a Mott insulator (MI) in the ionic Hubbard model¹ attracted new attention to the correlated BIs. Among the correlated BIs FeSi,2 and more recently FeSb2,3 have been subject of a particular interest as they are the only known 3d materials exhibiting behavior similar to Kondo insulators. At low temperatures the electrical resistivity $\rho(T)$ and magnetic susceptibility v(T) correspond to thermally activated narrow gan semiconductor. However, at higher temperatures (T≥300 K) the slope of $\rho(T)$ changes sign and becomes positive as in a metal.4 The metal-insulator crossover is consistent with the optical measurements where the gap in the low-T absorption spectrum starts getting filled with increasing temperature. with no trace of the gap observed⁴⁻⁶ any more at T ≥ 300 K. The magnetic susceptibility $\gamma(T)$ vanishes at low T. passes through a maximum near 500 K, and obeys a Curie-Weiss law at higher temperatures.24 Low electron doping by substituting Fe by Co (~10%), or the substitution of Si by Ge (~30%) yield a ferromagnetic metal.7 Recently a colossal Seebeck coefficient was reported in FeSby.

The band-structure calculations within local density approximation (LDA) predict FeSi to be a nonmagnetic semiconductor3 in agreement with the low-temperature exnerimental data. Interestingly, contrary to the usual underestimation of the gap by LDA, the calculated value ~100 meV is two to three times larger than the estimate from optical and photoemission measurements.4-6 Using the LDA+U approach to mimic the effect of on-site Coulomb repulsion. Anisimov et al.¹⁰ found a ferromagnetic metallic phase very close by in energy. This approach has also allowed to describe transition from nonmagnetic insulator to ferromagnetic metal with substitution Ge for Si in isoelectron electron series FeSi1-aGea11 and the semiconductormetal transition in FeSb2,12 Nevertheless, current band structure theory itself cannot explain the temperature dependence of physical properties.

To describe the susceptibility and other thermodynamic quantities, Mandres *et al.*¹ proposed a imperprint in hypertransfer of the state of the state of the state of the state (~500 K) peaks separated by a gap of (~100 K). The origin of the narrow peaks was attributed to an extense renormalization of the noninterscript bands similar to Cebased Knodb numbers places that the state of the the submitted of the state of the the state by the state of the state of the state of the Fe SJ states by bridge very strongly with p_0 bands a large of 8 V energy reground.

In this work, we study a minimal model of correlated covalent insultate² within the dynamical mean-field approximation (DMPT). While the construction of the model is apprecised to the study of the study of the study of the supprecised of the study of the study of the study of the width. Our goal is to use simple model free of the complexity of a multiband low-symmetry system to capture semiquantitatively the essential physics of FeSi/FeSi, and provide, act understood reference point for taker multiband vide.

In construction of the model we envision Hubbard Hamiltonian on a lattice with one orbital ner site, but more than one site in the primitive cell. The DMFT approximation allows us to calculate important physical quantities, in particular the single-particle spectrum, from the knowledge of the noninteracting spectral density $D(\omega)$ and the on-site repulsion U. We use U=1.5 eV throughout this work, which yields semiquantitative agreement with experiment; the rather small value can be justified by a strong Fe-ligand hybridization. The key feature of $D(\omega)$, obtained by truncating the LDA density of states for FeSb, so that the low energy neak and gap structure is cantured, is the presence of a gap between bands of the same orbital character. Fu and Doniach15 studied a two-orbital model with an on-site hybridization, which leads to a gapped $D(\omega)$. Furmann et al.¹⁶ calculated the single-particle and optical spectra of such model and addressed the question of interaction-driven BI to MI transition at high temperature.

In general, gapped local spectral function $D(\omega)$ is charac-

©2008 The American Physical Society

1098-0121/2008/78(3)/033109(4)

Prof. dr hab. R. J. Radwański

033109-1

Temperature-dependent correlations in covalent insulators: Dynamical mean-field approximation

J. Kuneš1,* and V. I. Anisimov2

¹Theoretical Physics III, Center for Electronic Correlations and Magnetism, Institute of Physics, University of Auguburg, Auguburg 86135, Germany ²Institute of Metal Physics, Russian Academy of Sciences-Ural Division, 620041 Yekaterinburg GSP-170, Russia (Rescived 16) June 2008: nublished 25 July 2008)

> etic metal with parameters realistic for FeSi and FeSb₂ systems. Our results show that the behavior of FeSi loss not imply microscopic description in terms of Kondo insulator (periodic Anderson model) as can be often ound in the literature, but in fact reflects generic properties of a broader class of materials.

from optical and photoemission measurements.^{4–6} Using the LDA+U approach to mimic the effect of on-site Coulomb repulsion, Anisimov *et al.*¹⁰ found a ferromagnetic metallic phase very close by in energy. This approach has also allowed to describe transition from nonmagnetic insulator to ferromagnetic metal with substitution Ge for Si in isoelectron electron series $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_{x}$,¹¹ and the semiconductormetal transition in FeSb_{2} .¹² Nevertheless, current band structure theory itself cannot explain the temperature dependence of physical properties.

T, passes through a maximum near 500 K, and obeys a Curie-Weish aw a higher temperatures.³⁴ Low electron doping by substituting Fe by Co (\approx 10%), or the substitution of Si by Ge (\approx 30%) yield a ferromagnetic metal.⁷ Recently a colossal Seebeck coefficient was reported in FeSb₂.⁶

The band-streame calculations within local density approximation (LDA) predict Fe'si be a nonmapped proximation (LDA) predict Fe'si be a nonmapped prediction of the set and the set of th

 vide a well understood reference point for later multiband study.

In construction of the model we environ Halon methods muon on a link with one outball performance that the method of the model of the performance of the low us to calculate importung traced quantities, in particutar the single-particle density $D(\omega)$ and the co-side effect monumerating with density $D(\omega)$ and the co-side effect of the single-particle account of the single-particle density of the single-particle density $D(\omega)$ and the co-side effect of the single-particle density of the between hands due to a gapped $D(\omega)$ formation $d = d^2$ model and addressed the operation.

In general, gapped local spectral function $D(\omega)$ is charac

1098-0121/2008/78(3)/033109(4)

02008

Prof. dr hab. R. J. Radwański

Dyskretna struktura elektronowa i orbitalny magnetyzm