

# Pole krystaliczne w izolatorach Motta

## Magnetyczne przejścia fazowe opisywane w skali atomowej (NiO, UPd<sub>2</sub>Al<sub>3</sub>, ErNi<sub>5</sub>)

R. J. Radwanski<sup>1,2</sup> i Z. Ropka<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Centrum Fizyki Ciała Stałego, Św. Filipa 5, 31-150 Kraków,

<sup>2</sup> Instytut Fizyki, Uniwersytet Pedagogiczny, 30-084 Kraków.

Teoretyczny opis magnetycznych, elektronowych i spektroskopowych właściwości jak również struktury elektronowej związków zawierających atomy metali przejściowych jest nieustannie przedmiotem gorącej debaty wewnątrz współczesnej społeczności fizyki ciała stałego. Nawet magnetyczne i izolacyjne właściwości prostych związków, takich jak monotlenki FeO, CoO czy NiO (standardowy izolator Motta), nie są jeszcze dobrze teoretycznie opisane pomimo faktu, że mają one prostą strukturę krystalograficzną (*NaCl*) i prosty antyferromagnetyzm ( $T_N = 191$  K, 291 i 525 K, odpowiednio). W związkach ciężko-fermionowych YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> i UPd<sub>2</sub>Al<sub>3</sub> odkryto ostatnio stany zlokalizowane pomimo ich metalicznego zachowania.

Biorąc pod uwagę olbrzymi potencjał fizyki ciała stałego w Polsce, chcemy zaproponować teorię pola krystalicznego i orbitalny magnetyzm jako polski wkład do światowej fizyki. Rozwinięta przez nas Kwantowa Atomistyczna Teoria Ciała Stałego, QUASST- Quantum Atomistic Solid-State Theory, proponuje jako punkt wyjścia do opisu związków *3d/4f/5f* opis atomów/jonów *3d/4f/5f* tworzących dane ciało (Phys. Rev. B **63** (2001) 172404). Pragniemy otwarcie przedyskutować najbardziej fundamentalne problemy typu: “jest, czy - nie ma pola krystalicznego w związkach *3d/4f/5f*, metalicznych i w izolatorach”, “geneza anizotropii magnetokrystalicznej (jedno-jonowa czy inna)”, “ważność orbitalnego magnetyzmu” w przeciwieństwie do “zamrażania” momentu orbitalnego w opisie związków *3d*. Zastosowanie QUASST zilustrujemy na przykładzie 1) NiO (Acta Physica **1** (2006) 1; [www.actaphysica.eu](http://www.actaphysica.eu)), najprostszego i szeroko dyskutowanego izolatora Motta, 2) ciężko-fermionowego związku metalicznego, nadprzewodnika UPd<sub>2</sub>Al<sub>3</sub> oraz 3) konwencjonalnego metalicznego związku ErNi<sub>5</sub>.

Zaprezentujemy zestaw związków opisanych w ramach QUASST: monotlenki FeO, CoO i NiO, perowskity takie jak YTiO<sub>3</sub> (Acta Physica **5** (2007) 5), LaMnO<sub>3</sub> czy LaCoO<sub>3</sub> (Phys. Rev. B **67** (2003) 172401). Wszystkie te związki znane są jako izolatory Motta. YTiO<sub>3</sub> jest ferromagnetykiem z  $T_C$  równą 30 K. W YTiO<sub>3</sub> jony Ti<sup>3+</sup> mają jeden *d* elektron i otacza je sześć jonów O<sup>2-</sup>, co czyni ten związek sztandarowym do badania właściwości jonu Ti<sup>3+</sup> w zdystorsowanym oktaedrycznym polu krystalicznym w obecności oddziaływania spin-orbita. Mając QUASST potrafimy opisać strukturę elektronową zarówno w obszarze paramagnetycznym jak i w stanie ferromagnetycznym śledząc jej zmianę w  $T_C$ . Magnetyczne przejście fazowe jest widoczne, w szczególności, w temperaturowej zależności ciepła właściwego z charakterystycznym pikiem  $\lambda$  w  $T_C$ . Magnetyczne przejście, związane z łamaniem symetrii odwracalności czasu (breaking of the time-reversal symmetry), jest widoczne w charakterze funkcji własnej. QUASST opisuje zarówno stan podstawowy jak i termodynamikę. Określiśmy siłę oktupolowego pola krystalicznego. Dla NiO wartość  $10Dq$ , energia promocji  $t_{2g}$ - $e_g$ , określiliśmy jako 1.08 eV pomimo, że Soriano i wsp. w Phys.Rev. B **75** (2007) 233417 podają wartość tylko 0.1 eV, zaś Taguchi i wsp. w Phys.Rev.Lett. **100** (2008) wartość 0.3 eV. Już sam ten rozrzut wartości tego podstawowego parametru świadczy o braku teoretycznego opisu NiO w bieżącej literaturze.

W naszym podejściu do opisu związków *3d* łączymy fizykę ciała stałego z fizyką atomową i odkrywamy ważność orbitalnego magnetyzmu w opisie związków zawierających atomy *3d*. Wieloelektronowa teoria pola krystalicznego uwzględnia również silne korelacje elektronowe.