

Struktura elektronowa i własności magnetyczne ciężkofermionowego nadprzewodnika Ce_2PdIn_8 w oparciu o obliczenia z pierwszych zasad

A. Szajek¹, M. Werwiński¹, D. Kaczorowski², A. Ślebarski³

¹ Instytut Fizyki Molekularnej PAN, Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań,

² Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, Okólna 2, 50-422 Wrocław

³ Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski, ul. Uniwersytecka 4, 40-007 Katowice

Odkryty w 2009 roku [1] nadprzewodnik Ce_2PdIn_8 krystalizuje w strukturze typu Ho_2CoGa_8 . Jest to ciężkofermionowy ($\gamma_n=1000$ mJ/mol K²) antyferromagnetyk ($T_N=10$ K) wykazujący własności nadprzewodzące poniżej $T_c=0.68$ K.

Przedmiotem prezentacji będą własności elektronowe i magnetyczne Ce_2PdIn_8 uzyskane metodami obliczeniowymi z pierwszych zasad w oparciu o dwa programy Wien2k [2] i FPLO [3]. W obu metodach wykonuje się obliczenia z tzw. pełnym potencjałem, uwzględniane są efekty relatywistyczne, spinowa i orbitalna polaryzacja, a efekty korelacyjne traktowane są w ramach podejścia LSDA+U, dla wartości U równych 0, 1, 2, 3, 4, 5 i 6 eV. Gęstości stanów elektronowych wykorzystane zostały do wyznaczenia widm fotoemisyjnych w zakresie promieniowania rentgenowskiego (XPS), które porównane zostaną z widmami zmierzonymi.

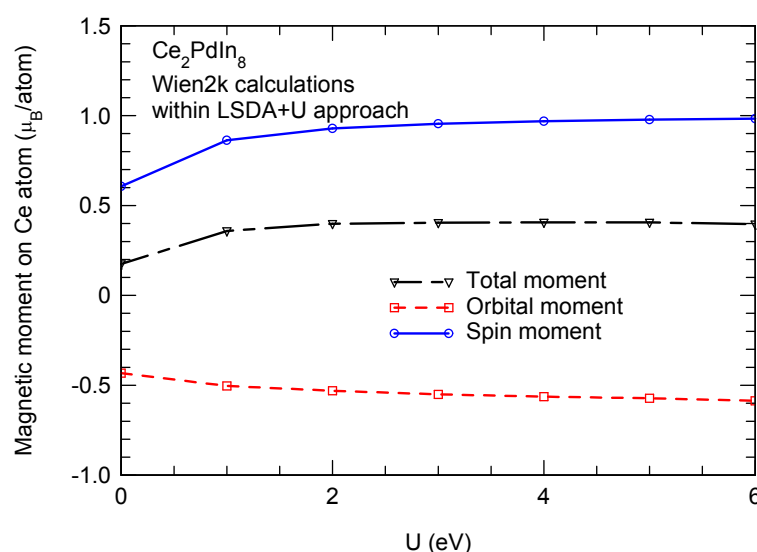


Fig. 1. Zależność momentu magnetycznego na atomie Ce w zależności od wartości parametru U.

Praca finansowana w ramach Sieci Naukowej *Materiały z silnie skorelowanymi elektronami: otrzymywanie, badania podstawowe i aplikacje (MSSE)* i grantu MNiSW nr N N202 1349 33.

Literatura

[1] D. Kaczorowski, A. P. Pikul, D. Gnida, and V. H. Tran, PRL 103, 027003 (2009)

[2] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), 2001.

[3] K. Koepf and H. Eschrig, Phys. Rev. B 59, 1743 (1999); <http://www.FPLO.de>