

✓ Přednáškový sál u knihovny, budova A, 1. patro

✓ Čtvrtek, **8. 12. 2011** ve **14:00** hod. ◀ **POZOR, ZMĚNA TERMÍNU!** ▶

Perovskity vzácných zemin: kombinace ab-initio přístupu a metody efektivního Hamiltoniánu

Pavel Novák

Fyzikální ústav AV ČR, Cukrovarnická 10, Praha 6

Abstract. 4f elektrony iontů vzácných zemin jsou silně korelovány a jejich korektní popis představuje obtížný problém. Metody založené na teorii funkcionálu hustoty (DFT) mohou dávat dobré výsledky pro základní stav, ale rozštěpení $(4f)^n$ elektronové konfigurace na multiplety je mimo jejich dosah. Na druhé straně metoda efektivního Hamiltoniánu přirozeným způsobem multiplety zahrnuje, ale zpravidla závisí na velkém počtu volitelných parametrů. V této souvislosti význačnou roli hraje krystalové pole. Určení parametrů krystalového pole (CFP) je složité a dosud není k dispozici žádný spolehlivý způsob jak je vypočítat. Jejich hodnoty jsou obvykle získány srovnáním experimentu a výsledků získaných efektivním Hamiltoniánem.

V tomto příspěvku navrhujeme zkombinovat metodu efektivního Hamiltoniánu implementovanou v programu "lanthanide" [1] s výsledky programu WIEN2k [2], který je jednou z realizací DFT. Pomocí DFT je určena hustota 4f stavů a z ní pak vypočteny CFP. Při tom je vyloučena interakce 4f stavů s potenciálem nesférické složky 4f elektronové hustoty a je možno určit roli hybridizace 4f stavů se zvolenými stavy okolních atomů.

Navrhovaný přístup je nejprve aplikován na konfiguraci $(4f)^8$ iontu Tb^{3+} v $TbAlO_3$, pro který bylo 14 nezávislých CFP určeno analýzou optických spekter [3]. Je-li započtena hybridizace $Tb(4f)$ stavů s 2p stavy kyslíkových ligandů vykazují vypočtené a experimentální CFP dobrý souhlas (hybridizace je odpovědná za přibližně 50% energetického rozštěpení).

Druhý uvažovaný systém je $Pr_{0.5}Ca_{0.5}CoO_3$ s krystalovou strukturou stejnou jako $TbAlO_3$, pro který však nejsou k dispozici žádná optická spektra. V tomto systému může být iont praseodymu trímocný, nebo čtyřmocný. Pro obě mocenství je hybridizace výrazně silnější než pro iont Tb^{3+} . Výše popsaným způsobem jsou vypočteny CFP a po jejich dosazení do programu "lanthanide" jsou určeny energetické stavy a magnetické momenty Pr^{3+} i Pr^{4+} .

[1] S. Edwardsson and D. Aberg, *Comp. Phys. Commun.* **133**, 396 (2001).

[2] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties.

[3] J. B. Gruber *et al.*, *J. Lumin.* **128**, 1271 (2008).
