



Kraków, 25 listopada 2015

## ***Właściwości z pogranicza wymiarów w nowym materiale***

*Tlenki żelaza występują w przyrodzie w wielu odmianach, często znacznie różniących się między sobą pod względem struktury i właściwości fizycznych. Jednak najnowsza odmiana tlenku żelaza, niedawno wytworzona i przebadana przez naukowców z Krakowa, zaskoczyła i fizyków, i inżynierów – cechami dotąd nieobserwowanymi w żadnym materiale.*

Metaliczny kryształ praktycznie bez defektów, z unikatowym konglomeratem cech elektrycznych i magnetycznych oraz atomami mogącymi drgać tak, jakby liczba wymiarów została zredukowana – to nowa odmiana tlenku żelaza (FeO). Niezwykły materiał wytworzyli, wymodelowali i przebadali fizycy Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego KNOW w Krakowie, w skład którego wchodzi m.in. Instytut Fizyki Jądrowej PAN (IFJ PAN), Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN (IKiFP PAN) i Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej (WFilS AGH). Grupa z IFJ PAN była odpowiedzialna za komputerowe symulacje materiałowe. Zespół z IKiFP PAN i WFilS AGH, który był inicjatorem badań, zrealizował część eksperymentalną, obejmującą m.in. wytworzenie warstw nowego tlenku żelaza i doświadczalne poznanie jego właściwości. W pracach brali udział również fizycy z Europejskiego Centrum Promieniowania Synchrotronowego (European Synchrotron Radiation Facility, ESRF) w Grenoble, Uniwersytetu Sorbona w Paryżu i Uniwersytetu Pedagogicznego w Krakowie.

„Modelowaniem materiałów, w tym różnych odmian tlenku żelaza, zajmujemy się od lat. Nasze modele, konstruowane w oparciu o podstawowe zasady mechaniki kwantowej i fizyki statystycznej, pozwalają wyznaczać położenie atomów w sieci krystalicznej i umożliwiają przewidywanie właściwości elektrycznych, magnetycznych czy termodynamicznych materiału”, wyjaśnia dr hab. Przemysław Piekarczyk, kierownik Zakładu Komputerowych Badań Materiałów IFJ PAN.

Specjalnością krakowskich teoretyków są badania dynamiki sieci krystalicznych, pozwalające ustalać, jak drgają atomy w kryształach danego materiału. Jednym z podstawowych narzędzi pracy jest tu program PHONON, stworzony i rozwijany przez prof. dr. hab. Krzysztofa Parlińskiego (IFJ PAN). Do optymalizowania modelu użyto programu VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package).

„Nasz model zawierał warstwę atomów tlenu i żelaza o monoatomowej grubości, osadzoną na podłożu z platyny. Atomy w monowarstwie były ułożone w strukturę heksagonalną, przypominającą plaster miodu. Podobną, heksagonalną budowę mają słynne dwuwymiarowe warstwy grafenowe”, opisuje dr Piekarczyk i podkreśla, że grafen tworzy jednak idealnie płaską powierzchnię, w całości złożoną z atomów węgla. Tymczasem modelowana warstwa tlenku żelaza okazała się pofałdowana: każdy atom żelaza był tu otoczony trzema atomami tlenu, znajdującymi się odrobinę dalej od podłoża niż żelazo.

Obliczenia przeprowadzone dla pojedynczej monowarstwy pozwoliły ustalić, jakie drgania będą wykonywały atomy w sieci krystalicznej przy różnych energiach. Przewidywania teoretyczne skonfrontowano z rzeczywistością dzięki grupie prof. dr. hab. Józefa Koreckiego (IKiFP PAN i AGH). Nie tylko opracowała ona technologię wytwarzania próbek z wieloma monowarstwami tlenku żelaza na podłożu platynowym, ale także w ciągu kilku lat przeprowadziła za pomocą synchrotronu ESRF w Grenoble szereg pomiarów ich właściwości.

„W naszym laboratorium kluczem do stabilizowania materiałów niewystępujących w naturze jest proces osadzania warstw na monokrystalicznym podłożu – w tym przypadku był to odpowiednio zorientowany monokryształ platyny – które to podłoże wymusza strukturę rosnącej warstwy. W laboratoriach dotychczas udawało się wytwarzać struktury o stechiometrii FeO liczące nie więcej niż dwie monowarstwy tlenku. Po dodaniu kolejnych warstw całość samoczynnie przekształcała się w magnetyt Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. My byliśmy w stanie tak dobrać parametry procesu, że struktura FeO pozostawała stabilna do grubości kilkunastu warstw atomowych”, mówi prof. Korecki.

Eksperymenty w synchrotronie w Grenoble pozwoliły stwierdzić, że dane z pomiarów dotyczące drgań atomów w sieci krystalicznej nowej odmiany tlenku żelaza świetnie zgadzają się z modelem teoretycznym. Analiza wyników dla próbek o różnej liczbie warstw przyniosła jednak coś więcej niż tylko samo potwierdzenie poprawności opisu teoretycznego.

Tlenek żelaza zwykle tworzy sieci krystaliczne, w których atomy są rozmieszczone w narożnikach sześciangu (taką strukturę ma m.in. wustyt, a z innych substancji – sól kuchenna). Spodziewano się, że po naniesieniu kolejnych warstw FeO taka sześcienna struktura wyłoni się samoczynnie. Tymczasem analiza drgań atomów w sieci krystalicznej próbek wykazała, że układy liczące nawet kilkanaście monowarstw nadal zachowują budowę heksagonalną. Oznacza to, że krakowskim naukowcom udało się wytworzyć nową odmianę tlenku żelaza, o różnej od dotychczasowych strukturze krystalicznej.

Kolejne pomiary wykazały, że gdy liczba monowarstw liczy od sześciu do dziesięciu, atomy żelaza w nowym kryształcie wykazują dalekozasięgowe uporządkowanie magnetyczne. To niecodzienna cecha, ponieważ podstawowa odmiana tlenku żelaza jest antyferromagnetykiem, w którym momenty magnetyczne atomów żelaza w różnych miejscach są zorientowane w przeciwnych kierunkach, a więc substancja jako całość nie jest namagnesowana. Tymczasem właściwości magnetyczne nowej odmiany FeO są widoczne nawet w temperaturze pokojowej.

„Od wielu lat trwają poszukiwania materiałów do budowy urządzeń spintronicznych. Przyrządy te wykorzystują nie tylko transport ładunku, czyli prąd elektryczny, ale również transport spinu elektronu odpowiedzialnego za właściwości magnetyczne”, przypomina dr Piekarz. „Nasz nowy materiał nie jest izolatorem, jak większość tlenków, lecz metalem. Tak rzadkie dla tlenków połączenie właściwości elektrycznych i magnetycznych powoduje, że może być interesujący dla spintroniki, a także przy konstruowaniu różnego typu czujników i detektorów”.

Szpecially ciekawa okazała się jednak analiza drgań atomów w zależności od liczby warstw FeO na platynie. Dla jednej lub dwóch warstw ruch atomów ma charakter dwuwymiarowy. Gdy liczba warstw wynosi sześć lub więcej, atomy drgają jak w typowym kryształcie trójwymiarowym. W badanych dotychczas materiałach charakter drgań był ściśle związany z wymiarowością układu. Tymczasem w nowej odmianie tlenku żelaza przy trzech, czterech i pięciu warstwach atomy okazały się drgać w sposób pośredni, odpowiadający ułamkowym liczbom wymiarów.

„Mamy do czynienia z pierwszym materiałem, w którym charakter drgań atomów stopniowo przechodzi od dwuwymiarowego do trójwymiarowego. Podobny efekt, choć przewidywany teoretycznie, nie był dotychczas obserwowany w żadnej substancji”, stwierdza dr Piekarz.

Badania nad nową odmianą tlenku żelaza, sfinansowane z grantów Narodowego Centrum Nauki, opisano w znanym czasopiśmie fizycznym „Physical Review Letters”.

silnych, fazy skondensowanej materii, fizykę medyczną, inżynierię nanomateriałów, geofizykę, biologię radiacyjną i środowiskową, radiochemię, dozymetrię oraz fizykę i ochronę środowiska – są każdego roku przedstawiane w ponad 450 artykułach publikowanych w recenzowanych czasopismach naukowych. Częścią Instytutu jest nowoczesne Centrum Cyklotronowe Bronowice, unikalny w skali europejskiej ośrodek obok badań naukowych zajmujący się terapią protonową nowotworów. IFJ PAN jest członkiem Krakowskiego Konsorcjum Naukowego „Materia-Energia-Przyszłość” o statusie Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego (KNOW) na lata 2012-2017. Instytut zatrudnia ponad pół tysiąca pracowników. W kategoryzacji MNiSW Instytut został zaliczony do kategorii naukowej A+ w grupie nauk ścisłych i inżynierskich.

#### **KONTAKT:**

dr hab. **Przemysław Piekarz**  
kierownik Zakładu Komputerowych Badań Materiałów  
Instytut Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk  
tel. +48 12 6628281  
email: [przemyslaw.piekarz@ifj.edu.pl](mailto:przemyslaw.piekarz@ifj.edu.pl)

#### **PRACE NAUKOWE:**

„Phonons in Ultrathin Oxide Films: 2D to 3D Transition in FeO on Pt(111)”; N. Spiridis, M. Zając, P. Piekarz, A.I. Chumakov, K. Freindl, J. Goniakowski, A. Koziol-Rachwał, K. Parliński, M. Ślęzak, T. Ślęzak, U.D. Wdowik, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki; Physical Review Letters 115 18; DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.186102

#### **POWIĄZANE STRONY WWW:**

<http://www.ifj.edu.pl/>  
Strona Instytutu Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk.

<http://press.ifj.edu.pl/>  
Serwis prasowy Instytutu Fizyki Jądrowej PAN.

#### **MATERIAŁY GRAFICZNE:**

IFJ151125b\_fot01s.jpg

HR: [http://press.ifj.edu.pl/news/2015/11/IFJ151125b\\_fot01.jpg](http://press.ifj.edu.pl/news/2015/11/IFJ151125b_fot01.jpg)

Komputerowa wizualizacja pojedynczej warstwy nowej odmiany tlenku żelaza, osadzonej na podłożu platynowym. Atomy żelaza w kolorze brązowym, atomy tlenu w kolorze błękitnym. (Źródło: IFJ PAN)