



Kraków, 26 maja 2020 r.

## **Nowy rodzaj sprzężonych oscylacji elektronowo-strukturalnych odkryty w magnetycie**

*Międzynarodowy zespół naukowców odkrył egzotyczne właściwości kwantowe kryjące się w magnetycie, najstarszym materiale magnetycznym znanym ludzkości. Badania te wykazały istnienie niskoenergetycznych oscylacji, które potwierdzają ważną rolę oddziaływań elektronów z siecią krystaliczną. To kolejny krok do pełnego zrozumienia mechanizmu przejścia fazowego metal-izolator w magnetycie, a w szczególności do poznania własności dynamicznych i zachowania krytycznego tego materiału blisko temperatury przejścia.*

Magnetyt ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) jest pospolitym minerałem, którego silne własności magnetyczne znane były już w starożytnej Grecji. Początkowo znajdował zastosowanie głównie w kompasach, a w późniejszym czasie w wielu innych urządzeniach, służących między innymi do zapisu informacji. Używany jest powszechnie również w procesach katalitycznych. Nawet zwierzęta korzystają z właściwości magnetytu do wykrywania pola magnetycznego – na przykład ptaki stosują go w nawigacji.

Magnetyt wzbudza również niemałe zainteresowanie fizyków, ponieważ w temperaturze około 125 K zachodzi w nim egzotyczne przejście fazowe, które nazwano na cześć holenderskiego fizyka Everta Verweya. Przejście Verweya było również historycznie pierwszą zaobserwowaną przemianą fazową metalu w izolator. Podczas tego niezwykle złożonego procesu przewodnictwo elektryczne zmienia się aż o dwa rzędy wielkości i pojawia się transformacja struktury krystalicznej. Verwey zaproponował mechanizm przejścia polegający na lokalizacji elektronów na jonach żelaza, co prowadzi do pojawienia się rozkładu przestrzennego ładunków  $\text{Fe}^{2+}$  i  $\text{Fe}^{3+}$  w niskich temperaturach.

W ostatnich latach badania dyfrakcyjne i zaawansowane obliczenia potwierdziły hipotezę Verweya, ujawniając jednocześnie znacznie bardziej złożony rozkład ładunków (16 nierównoważnych położeń atomów żelaza) i dowodząc istnienia porządku orbitalnego. Podstawowymi składnikami tego uporządkowania ładunkowo-orbitalnego są polarony – kwazicząstki powstające na skutek lokalnego odkształcenia sieci krystalicznej spowodowanego oddziaływaniem elektrostatycznym przemieszczającej się w kryształce naładowanej cząstki (elektronu lub dziury). W przypadku magnetytu przybierają one formę trymeronów, czyli układów zbudowanych z trzech jonów żelaza, gdzie środkowy atom ma więcej elektronów niż dwa skrajne atomy.

Najnowsze badania, opublikowane w czasopiśmie „Nature Physics”, zostały przeprowadzone przez naukowców z wielu wiodących ośrodków badawczych na całym świecie. Ich celem było eksperymentalne wykrycie wzbudzeń mających wpływ na porządek ładunkowo-orbitalny magnetytu oraz opisanie ich za pomocą zaawansowanych metod teoretycznych. Część doświadczalna została wykonana w MIT (Edoardo Baldini, Carina Belvin, Ilkem Ozge Ozel, Nuh Gedik); próbki magnetytu przygotowano w Akademii Górniczo-Hutniczej (Andrzej Kozłowski), zaś analizy teoretyczne przeprowadzono w kilku miejscach: w Instytucie Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk (Przemysław Piekarczyk, Krzysztof Parlinski), na Uniwersytecie Jagiellońskim i w Instytucie Maxa Plancka (Andrzej M. Oleś), Uniwersytecie La Sapienza w Rzymie (José Lorenzana), Uniwersytecie Northeastern w Bostonie (Gregory Fiete), Uniwersytecie Tekszańskim w Austin (Martin Rodriguez-Vega) oraz Uniwersytecie Technicznym w Ostrawie (Dominik Legut).

*W Instytucie Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk od wielu lat prowadzimy badania magnetytu, stosując metody obliczeniowe z pierwszych zasad – wyjaśnia prof. Przemysław Piekarz. – Badania te pokazały, że w przejściu Verweya ważną rolę odgrywają silne oddziaływania elektronów z drganiami sieci, czyli fononami.*

Naukowcy z MIT określili optyczną odpowiedź magnetytu w bardzo dalekiej podczerwieni dla kilku temperatur. Następnie oświetlali kryształ ultrakrótkim impulsem laserowym (wiązką wzbudzącą) i dokonywali pomiaru zmiany w absorpcji w dalekiej podczerwieni za pomocą opóźnionej wiązki próbkującej. *Jest to potężna technika optyczna, która pozwoliła nam dokładniej przyjrzeć się ultraszybkim zjawiskom rządzącym światem kwantowym – mówi prof. Nuh Gedik, kierownik grupy badawczej z MIT.*

Pomiary te wykazały istnienie niskoenergetycznych wzbudzeń porządku trymeronowego, które odpowiadają oscylacjom ładunkowym sprzężonym z deformacją sieci. Energia dwóch koherentnych modów maleje do zera przy zbliżaniu się do przemiany Verweya – wskazując na ich zachowanie krytyczne w pobliżu tego przejścia. Analizy teoretyczne pozwoliły na opisanie nowo odkrytych wzbudzeń jako koherentnie tunelujących polaronów. Bariere energetyczną dla procesu tunelowania oraz inne parametry modelu wyliczono przy zastosowaniu teorii funkcjonału gęstości, opartej na kwantowo-mechanicznym opisie cząsteczek i kryształów. Związek tych oscylacji z przejściem Verweya potwierdzono dzięki wykorzystaniu modelu Ginzburga-Landaua. Obliczenia pozwoliły również wyeliminować inne możliwe wyjaśnienia zaobserwowanego zjawiska, uwzględniające zwykłe fonony i wzbudzenia orbitalne.

*Odkrycie tych oscylacji ma kluczowe znaczenie dla zrozumienia właściwości magnetytu w niskich temperaturach i mechanizmu przejścia Verweya – wyjaśniają dr Edoardo Baldini i Carina Belvin z MIT, główni autorzy artykułu. – W szerszym kontekście wyniki te ujawniają, że połączenie ultraszybkich narzędzi optycznych oraz najnowocześniejszych metod obliczeniowych umożliwia badanie materiałów kwantowych, w których występują egzotyczne fazy z uporządkowaniem ładunkowo-orbitalnym.*

Uzyskane wyniki prowadzą do kilku bardzo istotnych wniosków. Po pierwsze, porządek trymeronowy w magnetycie posiada elementarne wzbudzenia o bardzo niskiej energii, pochłaniające promieniowanie w zakresie dalekiej podczerwieni widma elektromagnetycznego. Po drugie, wzbudzenia te są kolektywnymi fluktuacjami ładunku i deformacji sieci, wykazującymi zachowanie krytyczne, i z tego względu biorą udział w przejściu Verweya. Ponadto, otrzymane wyniki rzucają również nowe światło na mechanizm współdziałania i własności dynamiczne leżące u podstaw złożonego mechanizmu tej przemiany.

*Jeśli chodzi o plany na przyszłość naszego zespołu, to w ramach kolejnych etapów prac zamierzamy skupić się na przeprowadzeniu analiz teoretycznych mających na celu lepsze zrozumienie zaobserwowanych sprzężonych oscylacji elektronowo-strukturalnych – podsumowuje prof. Piekarz.*

Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk (IFJ PAN) w Krakowie zajmuje się strukturą materii i własnościami oddziaływań fundamentalnych od skali kosmicznej po wnętrza cząstek elementarnych. Wyniki badań – obejmujących fizykę i astrofizykę cząstek, fizykę jądrową i oddziaływań 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 600 artykułach publikowanych w recenzowanych wysoko punktowanych 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 2017 roku Komisja Europejska przyznała IFJ PAN prestiżowe wyróżnienie „HR Excellence in Research” jako instytucji stosującej zasady „Europejskiej Karty Naukowca” i „Kodeksu Postępowania przy rekrutacji pracowników naukowych”. W kategoryzacji MNiSW Instytut został zaliczony do kategorii naukowej A+ w grupie nauk ścisłych i inżynierskich.

**KONTAKT:**

dr hab. Przemysław Piekarczyk  
Instytut Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk  
tel. +48 12 662 8281  
e-mail: przemyslaw.piekarczyk@ifj.edu.pl

**PUBLIKACJE NAUKOWE:**

1. Edoardo Baldini, Carina A. Belvin Martin Rodriguez-Vega, Ilkem Ozge Ozel, Dominik Legut, Andrzej Kozłowski, Andrzej M. Oleś, Krzysztof Parlinski, Przemysław Piekarczyk, José Lorenzana, Gregory A. Fiete i Nuh Gedik  
„Discovery of the soft electronic modes of the trimeron order in magnetite”  
*Nature Physics* **16**, 541–545 (2020)  
DOI: 10.1038/s41567-020-0823-y

**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:**

IFJ20200526\_foto1s.jpg

HR: [http://press.ifj.edu.pl/news/2020/05/26/IFJ20200526\\_foto1s.jpg](http://press.ifj.edu.pl/news/2020/05/26/IFJ20200526_foto1s.jpg)

Ilustracja nowo odkrytych fluktuacji ładunkowych w strukturze trymeronowej magnetytu indukowanych wiązką lasera.  
(Źródło: Ambra Garlaschelli i MIT)