

Związki na bazie pierwiastków d-elektronowych krystalizują w strukturze regularnej typu MgAgAs, zwane fazami Heuslera tworzą liczną klasę materiałów o szerokiej gamie różnorodnych własności fizykochemicznych, które mogą być wykorzystane w licznych zastosowaniach, głównie w obszarach spintroniki i energetyki opartej na źródłach odnawialnych. Od szeregu lat materiały te są intensywnie badane w kontekście takich zagadnień, jak np.: fotowoltaika, gigantyczny magnetoopór, pami kształtu, efekt magnetokaloryczny, termoelektryczność, magnetyczne półprzewodniki, semimetale i półmetale silne korelacje elektronowe, magnetyzm, nadprzewodnictwo. Ze względu na swoją multifunkcjonalność, łatwo modyfikowalność niewielkimi zmianami składu, morfologii lub różnymi parametrami zewnętrznymi, związki te nazywane są niekiedy materiałami o „własnościach na zamówienie”.

W kontekście do zgromadzonej bogatej wiedzy na temat d-elektronowych faz Heuslera, bardzo niewiele wiadomo dotychczas o ich odpowiednikach na bazie ziem rzadkich. Pionierskie publikacje w tej dziedzinie powstały dopiero przed kilkoma laty w rezultacie prac eksperymentalnych zrealizowanych w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu przy współpracy z Instytutem Maxa Plancka Fizyki Chemicznej Ciała Stałego w Dreźnie. Uzyskane wyniki są podstawą dla sformułowania jednej z dwóch podstawowych hipotez badawczych w niniejszym projekcie. Postuluje się, że fazy Heuslera na bazie ziem rzadkich cechują się unikalnymi własnościami fizykochemicznymi, wysoce użytecznymi dla nowoczesnych rozwiązań technicznych i technologicznych, które stosunkowo łatwo mogą być „przestrajane” za pomocą metod chemicznych lub metalurgicznych w celu optymalizacji ich charakterystyk funkcjonalnych. W oparciu o wyniki własne i przesłanki literaturowe, do kompleksowych badań fizycznych, prowadzonych z wykorzystaniem nowoczesnych technik eksperymentalnych i wspomaganym modelowaniem teoretycznym, wytypowano fazy Heuslera typu RTX, gdzie R jest pierwiastkiem ziemi rzadkiej, T jest d-elektronowym metalem przejściowym (Ni, Pd, Pt, ...), a X jest pierwiastkiem p-elektronowym z V grupy układu okresowego (Sb, Bi). Spodziewa się, że realizacja projektu istotnie przyczyni się do pogłębienia podstawowej wiedzy na temat zjawisk fizycznych w fazach Heuslera, a wyniki prac zmierzających do optymalizacji multifunkcjonalnych charakterystyk faz RTX (np. termoelektrycznych) staną się inspiracją dla dalszych działań w zakresie inżynierii materiałowej, w kierunku ich wykorzystania w nowoczesnych gałęziach techniki i technologii.

Drugą hipotezą badawczą, stanowiącą w istocie rdzę naukowej niniejszego projektu, przewiduje, że związki Heuslera na bazie ziem rzadkich są doskonałymi kandydatami na izolatory/semimetale topologiczne, w których obserwowane będą niedawno przewidziane teoretycznie zjawiska, takie jak: topologiczne nadprzewodnictwo, topologiczny antyferromagnetyzm, czy te egzotyczne wzbudzenia fal spinowych topologicznie sprzężonych z polem elektromagnetycznym. Własności te pojawiają się powinny w związkach RTX ze względu na silne sprzężenie spinowo-orbitalne typu Rashby, powodowane brakiem inwersji i ciękich atomów w ich strukturze krystalicznej. Na obecność nietrywialnych stanów topologicznych w fazach RTX wskazują obliczenia struktury elektronowej, potwierdzają je wyniki eksperymentalnych badań własnych oraz pierwsze publikacje z prac do wiadczalnych prowadzonych obecnie w najlepszych ośrodkach naukowych na świecie. W ten sposób, multifunkcjonalny charakter związków Heuslera wzbogaca się o dodatkowe, niezwykle własności elektronowe o naturze topologicznej, którym przypisano już w literaturze potencjał rewolucji technologicznej, a to ze względu na ich zasadnicze znaczenie dla informatyki kwantowej, magnetoelektroniki, czy też dla obszaru odnawialnych źródeł energii. Ze względu na pionierski charakter zagadnień dotyczących tej zupełnie nowej tematyki, prace projektowe będą reagować na doniesienia literaturowe, a ich rzeczywisty przebieg warunkowany będzie osiąganymi rezultatami. W pierwszej fazie, wnioskodawcy planują skupić się na badaniach topologicznego nadprzewodnictwa i topologicznego antyferromagnetyzmu w fazach RPdBi. Waga naukowych uzyskiwanych wyników wyznacza będą nieznane dotychczas emergentne zjawiska wielociałowe, związane ze współistnieniem kilku parametrów porządku w materiałach o nietrywialnej strukturze elektronowej charakterystycznej dla izolatora lub semimetalu topologicznego.