

Sprzężenie właściwości materiałów z ich strukturą krystaliczną, jest głównym zagadnieniem współczesnej krystalografii fizycznej. Powiązanie średniej struktury materiału, a także lokalnego uporządkowania oraz lokalnego odkształcenia od średniej struktury z chemicznymi i fizycznymi właściwościami materiałów stanowi tematykę badawczą wielu grup naukowych na całym świecie. Jednym ze szczególnie intensywnie badanych obszarów z zakresu badań własności magnetycznych materiałów, jest poszukiwanie kandydatów na kwantowe ciecze spinowe (ang. : Quantum Spin Liquid - QSL).

QSL jest to egzotyczny stan materii, w którym w stanie podstawowym silnie oddziałujące momenty magnetyczne nie podlegają daleko-zasięgowemu uporządkowaniu nawet w temperaturze 0 K. Stan podstawowy jest natomiast superpozycją wielu, fluktuujących stanów, różnych wzajemnych orientacji momentów magnetycznych [1]. Konsekwencją istnienia QSL jest możliwość występowania kwazicząstek – fermionów Majorany, jako stanów wzbudzonych [2]. Jedną z grup związków, potencjalnych kandydatów na QSL są materiały, których struktura krystaliczna określana jest jako płaska struktura heksagonalna (ang.: honeycomb like lattice). W związkach o takiej strukturze możliwe jest zrealizowanie stanu QSL przez atomy o spinie $\frac{1}{2}$. Sytuacja taka opisywana jest za pomocą teoretycznego modelu Kitaev'a [3]. Rzeczywista realizacja powyższego modelu nie została jeszcze jednoznacznie eksperymentalnie potwierdzona. Obecnie trwają intensywne poszukiwania takich materiałów. Jednym z niewielu przykładów QSL jest kryształ molekularny κ -(BEDT-TTF)₂Cu₂(CN)₃, w przypadku którego nie zaobserwowano dalekozasięgowego uporządkowania momentów magnetycznych aż do 20 mK [4].

Jedną z grup materiałów, które są potencjalnymi kandydatami na materiały QSL, są warstwowe struktury, w których atomy posiadające moment magnetyczny (spin = $\frac{1}{2}$) znajdują się w dwuwymiarowych warstwach. Warstwy te są następnie ułożone jedne na drugich, tworząc trójwymiarową strukturę krystaliczną. Przykładem takiego związku jest α -RuCl₃, gdzie 2D warstwy tworzą 3D strukturę oddziałując między sobą poprzez słabe wiązania Van der Waalsa. Z tego powodu wysoce prawdopodobne jest występowanie błędów w ułożeniu dwuwymiarowych warstw w trójwymiarowych kryształach, czyli występowanie odstępstw od periodycznych struktur typu najgęstszego upakowania. Odstępstwa te nazywane są defektami w ułożeniu dwuwymiarowych warstw w tym materiale (ang. stacking faults). W przypadku struktury typu „stacking faults” nie jest zachowana symetria translacyjna w kierunku osi prostopadłej do płaszczyzny dwuwymiarowych warstw.

Proponowanych jest wiele modeli struktury typu QSL, a głównym powodem tych rozbieżności jest fakt, iż struktura tego związku jest typu „stacking faults”. W pierwszej fazie projektu planuję zbadanie zmian modelowej struktury krystalicznej α -RuCl₃, w funkcji temperatury, tak aby opracowany model mógł być wykorzystywany do późniejszych badań oraz obliczeń magnetycznych. Z racji na warstwowy charakter powyższej grupy związków, niezbędne będzie szczegółowe zbadanie ich struktury z uwzględnieniem możliwych „stacking faults”.

Drugim kierunkiem badań będzie analiza lokalnego nieuporządkowania w badanych związkach. Dyfrakcja Bragga dostarcza, bowiem informacji o średniej strukturze materiału. W przypadku materiałów częściowo nieuporządkowanych możliwe są lokalne odkształcenia otoczenia poszczególnych atomów, co może wpływać szczególnie na własności magnetyczne materiałów. Lokalny nieporządek, lub lokalne uporządkowanie krótkozasięgowo można badać przy pomocy jednej z metod dyfrakcyjnych zwanej Pair Distribution Function (PDF). Również krótkozasięgowo uporządkowanie momentów magnetycznych może być badane przy użyciu dyfrakcji neutronów. Aby było to możliwe konieczne będzie dalsze rozwinięcie programu RMCProfile [5]. Pomiary oraz analiza danych typu PDF pozwoli na dokładne określenie lokalnej struktury krystalicznej materiałów, która bezpośrednio wpływa na oddziaływania magnetyczne spinów.

[1] L. Balents, Nature 464, 2010, 199

[2] Kitaev, A. Ann. Phys. 321, 2016, 2

[3] R. D. Johnson, S. C. Williams, A.A. Haghghirad, J. Singleton, V. Zapf, P. Manuel, I. I. Mazin, Y. Li, H. O. Jeschke, R. Valenti, and R. Coldea, Phys. Rev. B 92, 235119 (2015)

[4] P. Lampen-Kelley, A. Banerjee, A.A. Aczel, H.B. Cao, M.B. Stone, C.A. Bridges, J.-Q. Yan, S.E. Nagler, and D. Mandrus, Phys. Rev. Lett. 119, 2017, 237203

[5] M. G. Tucker, D. A. Keen, M. T. Dove, A. L. Goodwin and Q. Hui, J. of Phys. Cond. Mat. 19, 2007, 335218