

Kwazikryształ jest fazą skondensowaną materii wykazującą szczególny rodzaj uporządkowania przestrzennego atomów. W przeciwieństwie do klasycznych kryształów pozbawione są one symetrii translacyjnej, jednakże wzory przestrzenne tworzone przez lokalne skupiska atomów występują w sposób uporządkowany. Doskonałym przykładem kwazikryształu, wykorzystywanym w dydaktyce, łańcuch Fibonacciego, złożony z dwóch typów odcinków, długiego (L) i krótkiego (S). Tworzy się go w sposób iteracyjny, gdzie krótki odcinek w kolejnej iteracji jest zastępowany przez odcinek długi, a długi przez złożenie odcinka długiego i krótkiego. Warunkiem początkowym jest istnienie odcinka krótkiego. Przykładowa sekwencja wygląda następująco: 1) S → 2) L → 3) LS → 4) LSL → 5) LSLLS → ... . Sekwencja ma ściśle określony porządek pojawiania się odcinków długich i krótkich, jednak odległości między odcinkami tego samego typu są różne. Z uwagi na fakt występowania porządku, kwazikryształy zgodnie z nową definicją Międzynarodowej Unii Krystalograficznej z 1991 r. są kryształami, jednak dla rozróżnienia ich od klasycznych kryształów periodycznych, określa się je mianem kryształów aperiodycznych.

Obecnie znamy wiele metalicznych faz kwazikrystalicznych występujących głównie w stopach z aluminium oraz z cynkiem. Ważną grupą są kwazikryształy ikozaedryczne, czyli posiadające symetrię dwudziestościanu foremnego. Są to kwazikryształy, które są aperiodyczne w każdym kierunku przestrzeni. Dla przykładu, kwazikryształy dekadonalne mają jeden kierunek, w którym warstwy atomów są ułożone periodycznie. Kwazikryształy ikozaedryczne skupiły uwagę badaczy ze względu na fakt występowania tej fazy w stopach z pierwiastkami ziem rzadkich, które znane są z obecności zlokalizowanych stanów elektronowych podpowłoki 4f, odpowiadających za ich własności magnetyczne.

W 2021 roku w stopie Au-Ga-(Gd, Tb) odkryto występowanie dalekozasięgowego uporządkowania ferromagnetycznego, co stało się motywacją dla naszych badań. Było to zwieńczenie 20 lat badań nad magnetyzmem w kwazikryształach, gdzie jednostką podstawową struktury są klastry Tsai. Nasze badania również są skierowane na kwazikryształy ziem rzadkich, jednak w grupie faz Bergmana. Obie grupy nie mogłyby być bardziej od siebie różne. Fazy Bergmana wykazują spektrum koncentracji atomów ziem rzadkich, od 5-11%, gdzie fazy Tsai mają ściśle określoną koncentrację ~14-15%. Taka różnorodność koncentracji atomów magnetycznych w strukturze stwarza pole do prowadzenia badań nad magnetyzmem tych kwazikryształów. Grupa Bergmana, choć podjęto próby badania jej własności magnetycznych w przeszłości, została porzucona na rzecz grupy Tsai, ponieważ dla tej ostatniej znana była struktura atomowa. Struktura atomowa fazy Bergmana została rozwiązana dopiero w 2020 r. przez członka naszego zespołu projektowego. Uzbrojeni w nową wiedzę, postanowiliśmy przeprowadzić badania magnetyzmu w grupie kwazikryształów Bergmana na większą niż dotychczas skalę.

W szczególności, badaniu będą podlegały kwazikryształy Zn-Mg-{Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, oraz Y}, dla których warunki hodowli są znane. Po otrzymaniu powyższych spróbujemy syntezy kryształów z pozostałymi atomami ziem rzadkich. Mamy zamiar przeprowadzić szczegółowe badania strukturalne tych kwazikryształów, aby poznać otoczenie atomowe atomów ziem rzadkich. Otoczenie to ma ważny wpływ na ułożenie przestrzenne momentów magnetycznych, a tym samym poznanie go jest niezbędne w celu zrozumienia wyników badań eksperymentalnych. Jeśli chodzi o magnetyzm, to zbadamy zarówno statyczne, jak i dynamiczne ułożenie momentów. Niezbędne będzie użycie neutronów jako cząstek elektrycznie obojętnych, ale oddziałujących magnetycznie. Dzięki dyfrakcji neutronów będziemy mogli zbadać porządkowanie się momentów magnetycznych w strukturze w sposób dalekozasięgowy, poprzez obserwację pików Braggowskich, ale również lokalne korelacje obserwowalne w rozpraszaniu dyfuzyjnym. Metody eksperymentalne zostaną wsparte metodami komputerowymi, w szczególności zastosujemy metodę DFT, w celu oszacowania wartości parametrów oddziaływania wymiennego elektronów 4f. Obliczenia takie są rzadko wykonywane dla kwazikryształów z uwagi na brak symetrii periodycznej. W naszych obliczeniach skupimy się na skończonej liczbie klastrów atomowych. Przeprowadzenie obliczeń dla kilku wybranych lokalnych konfiguracji atomów pozwoli oszacować energię oddziaływania magnetycznego, a w konsekwencji pozwoli na symulowanie uporządkowania magnetycznego oraz dynamiki momentów w kontekście wyników eksperymentalnych.

Badania zaproponowane w projekcie dotyczą kwestii fundamentalnej. Oddziaływania magnetyczne stanowią podstawę współczesnej cywilizacji. Kwazikryształy są obecnie materiałami magnetycznymi o najwyższej możliwej symetrii. Oznacza to, że materiały takie powinny wykazywać bardzo małe pole koercji oczekiwane w każdym urządzeniu zmiennoprądowym. Nasze badania pozwolą odkryć naturę oddziaływań magnetycznych w stopach kryształów aperiodycznych poszerzając dotychczasową wiedzę o tę unikalną formę materii skondensowanej.