



XV Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa  
"Stulecie Nadprzewodnictwa"  
Kazimierz Dolny, 9-13 października 2011 r.

---

**Struktura elektronowa, magnetyzm i fluktuacje spinowe  
w nadprzewodzącym słabym ferromagnetyku  $Y_4Co_3$**

BARTŁOMIEJ WIENDLOCHA

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej,  
Akademia Górniczo-Hutnicza im. St. Staszica w Krakowie

Nadprzewodnictwo i magnetyzm układu  $Y_4Co_3$  (określanego również przy nieco innej stechiometrii jako  $Y_9Co_7$ ), pomimo że jest znane od ponad 30 lat [1], ciągle nie jest w pełni zrozumiane. W szczególności gruntowne badania struktury elektronowej i magnetyzmu tego związku przy użyciu metod *ab initio* nie były jak dotąd prowadzone. W referacie omówione zostaną wyniki obliczeń struktury elektronowej, przeprowadzone dla  $Y_4Co_3$  przy użyciu metody full-potential KKR, które dostarczają wielu nowych i interesujących informacji na temat własności związku. W szczególności obliczenia w stanie magnetycznym potwierdzają, że źródłem magnetyzmu układu jest pojedynczy atom kobaltu znajdujący się na nieuporządkowanej podsięci (2b) w komórce elementarnej, zawierającej 21 atomów, podczas gdy pozostałe atomy itru i kobaltu pozostają praktycznie w stanie niemagnetycznym. Co więcej, magnetyzm układu nosi cechy niskiej wymiarowości, ponieważ magnetyczne atomy kobaltu budują kwazi-jednowymiarowe łańcuchy wzdłuż osi  $z$  komórki elementarnej. Obliczony moment magnetyczny atomu Co(2b) nie jest duży (0.5 magnetona Bohra), a rozkład przestrzenny magnetyzacji spinowej w komórce związku pokazuje występowanie dużych rejonów w których polaryzacja spinowa jest zaniedbywane mała. To z kolei jakościowo pozwala sądzić, że w tych rejonach może występować singletowe nadprzewodnictwo typu BCS. Uzyskane z przybliżenia LDA wartości momentów magnetycznych oraz magnetyzacji są około 2.5-krotnie wyższe od wartości doświadczalnych, co wspiera zakwalifikowanie  $Y_4Co_3$  jako słabego ferromagnetyka z istotnymi fluktuacjami spinowymi. Siła fluktuacji spinowych została również przeanalizowana i oszacowano parametr sprzężenia  $\lambda_{sf} \simeq 0.1 - 0.2$ . Ponadto, zbadano wpływ ciśnienia na magnetyzm układu również uzyskując wyniki charakterystyczne dla słabego ferromagnetyka z fluktuacjami spinowymi.

- [1] A. Kołodziejczyk, B.V.B. Sarkissian, B.R. Coles, J. Phys. F: Met. Phys. **10**, L333 (1980).