

SEMINARIUM RENTGENOWSKIE

Dnia 6 grudnia 2012 r. o godz. 12.15, w sali D Instytutu Fizyki PAN, odbędzie się seminarium, na którym dr inż. Waldemar Tokarz z AGH, Kraków, wygłosi referat p.t.:

"Struktura elektronowa i właściwości magnetyczne La_{2/3}Pb_{1/3}Mn_{1-x}FexO₃"

Streszczenie:

W referacie przedstawione zostaną teoretyczne struktury elektronowe dla serii związków La_{2/3}Pb_{1/3}Mn_{1-x}FexO₃ ($x = 0, 1/12, 1/3$) i porównane z gęstościami stanów zmierzonymi w eksperymencie UPS oraz z zmierzonymi momentami magnetycznymi. Obliczenia wykonano z wykorzystaniem potencjału wymiennie korelacyjnego GGA w pakiecie WIEN2k pracującego w oparciu o teorię funkcjonału gęstości. Dla elektronów d żelaza i manganu w obszarze atomowym zastosowano metodę hybrydową łączącą energię wymiany Hartree-Fock z PBEsol. Uwzględniono również oddziaływania spin orbita. W rezultacie uzyskano gęstości stanów o charakterze półmetalicznym z przerwą energetyczną na poziomie energii Fermiego dla podpasem ze spinem w dół.

Dr Iraida Demchenko