

Nauki fizyczne temat nr 21	Physical sciences topic No. 21
<b>Wpływ struktury na właściwości spintroniczne, termoelektryczne i magnetokaloryczne materiałów o strukturze regularnej</b>	Impact of structure on spintronic, thermoelectric and magnetocaloric properties of materials with cubic structure
PhD supervisor: <b>dr hab. Jerzy Goraus, prof. UŚ</b> <a href="https://ab.us.edu.pl/emp?id=42861">https://ab.us.edu.pl/emp?id=42861</a>	
<b>Krótką charakterystyka założeń i celów badawczych</b> Badane materiały to stopy Heuslera, spinele oraz perowskity, czyli materiały o strukturze regularnej. Wiadomo, że spintroniczne właściwości są możliwe głównie dla stopów Heuslera o strukturze odwrotnej. Z wcześniejszych moich obliczeń teoretycznych wynika istnienie wyspy stabilności struktury odwrotnej (co udoskonala empiryczną regułę Burcha znaną od kilku dekad). Pierwszym celem będzie zbadanie eksperymentalne istnienia tej wyspy stabilności struktury odwrotnej (potwierdzenie lub obalenie przewidywań teoretycznych). Drugim celem jest zbadanie możliwości istnienia analogów bardziej złożonych struktur, wśród układów o strukturze bazowej. Na przykład wiadomo że istnieją podwójne perowskity. Odkryto również podwójne stopy pół-Heuslera (ang. double Half Heusler Alloys) o dobrych właściwościach termoelektrycznych. Czy podobne warianty nadstruktury są możliwe dla pełnych stopów Heuslera lub spineli? Jak takie nadstruktury można eksperymentalnie zaobserwować, w sposób inny niż w badaniach metodą dyfrakcji proszkowej. Jak zmienia się widmo fononowe i w konsekwencji ciepło właściwe? Jaki wpływ na preferowaną strukturę mają ładunki Mullikena na poszczególnych atomach? Jakie nowe prawidłowości można zauważyć w wynikach seryjnych obliczeń DFT? W jakim stopniu przewidywane właściwości	<b>Brief description of research assumptions and goals</b> The materials under investigation are Heusler alloys, spinels, and perovskites - materials with a cubic structure. It is established that spintronic properties are mostly possible for Heusler alloys with an inverse structure. My previous theoretical calculations indicate the existence of an inverse structure 'stability island' (which refines the empirical Burch rule known for several decades). The first objective is to experimentally investigate the existence of this inverse structure stability island (confirming or rejecting theoretical predictions). The second objective is to explore the potential existence of analogs of more complex structures within systems possessing the base structure. For instance, it is known that double perovskites exist. Double Half-Heusler alloys with favorable thermoelectric properties have also been discovered. Are similar superstructure variants possible for full Heusler alloys or spinels? How can such superstructures be observed experimentally using methods other than powder diffraction? How do the phonon spectrum and, consequently, the specific heat change? What influence do Mulliken charges on individual atoms have on the preferred structure? What new patterns can be observed in the results of systematic DFT calculations? To what extent do the magnetic properties predicted by DFT-based calculations correspond to



<p>magnetyczne, na podstawie obliczeń opartych o DFT odpowiadają eksperymentalnym obserwacjom. W zależności od wcześniejszej wiedzy i preferencji, doktorant może zajmować się badaniami eksperymentalnymi lub badaniami teoretycznymi (opartymi o symulacje DFT i różne modele zjawisk fizycznych).</p>	<p>experimental observations? Depending on earlier knowledge and preferences the PhD student can perform either experimental investigations or theoretical calculations (like DFT or model calculations).</p>
<p><b>Planowany wkład w rozwój dyscypliny</b> Reguła Burcha określa w sposób empiryczny kiedy w związkach Heuslera o wzorze ogólnym X<sub>2</sub>YZ tworzy się struktura odwrotna. Ma ona prosty charakter, biorący pod uwagę nominalny ładunek danego pierwiastka. Jeżeli liczba atomowa pierwiastka Y jest większa niż pierwiastka X, to tworzy się struktura odwrotna. Została ona zapostulowana dla metali przejściowych z bloku 3d. Wiadomo z wcześniejszych badań eksperymentalnych, że nie zawsze jest ona spełniona. Moje obecne obliczenia DFT sugerują, że istnieją wyspy stabilności fazy odwrotnej i sytuacja nie jest taka prosta jak w tej empirycznej regule. Jednym z celów (i wkładem do zrozumienia problemu) będzie odkrycie jakie reguły rządzą powstawaniem tych wysp stabilności, i czy analogi tej reguły istnieją dla bloku 4d oraz 5d? Ponadto będą prowadzone badania możliwych nadstruktur związków o strukturze stopu Heuslera, spineli lub perowskitu. Zarówno wśród związków Heuslera, jak i wśród spineli oraz perowskitów wiele związków ma strukturę elektronową umożliwiającą powstanie materiałów o możliwych zastosowaniach spintronicznych (określanych w literaturze jako Half-Metallic Ferromagnet, Spin Gapless Semiconductor). Tego rodzaju materiały mają też często dobre właściwości termoelektryczne lub magnetokaloryczne. Różne sposoby agregacji i analizy danych mogą również pozwolić na odkrycie nowych reguł i prawidłowości na podstawie wyników seryjnych obliczeń opartych o teorię DFT. W literaturze przedmiotu, właściwości magnetyczne związków Heuslera na ogół są wyjaśniane przez prostą regułę Slater-Paulinga. Na podstawie wyników moich wcześniejszych seryjnych obliczeń DFT, wiem że stanowi to zbyt daleko idące uproszczenie. Tu również, analiza procesów rządzących magnetyzmem i wpływu struktury na te</p>	<p><b>Planned contribution to the development of the discipline</b> Burch's rule empirically determines when the inverse structure forms in Heusler compounds with the general formula X<sub>2</sub>YZ. It is straightforward in nature, based on the nominal charge of a given element. Specifically, if the atomic number of element Y is greater than that of element X, the inverse structure is formed. This rule was originally postulated for transition metals in the 3d block. However, prior experimental research indicates that it is not always obeyed. My current DFT calculations suggest the existence of 'stability islands' for the inverse phase, indicating that the situation is more complex than the empirical rule implies. One of the primary objectives (and a contribution to understanding this problem) is to uncover the rules governing the formation of these stability islands and to determine whether analogues of this rule exist for the 4d and 5d blocks. Furthermore, research will be conducted on possible superstructures of compounds possessing Heusler, spinel, or perovskite structures. Among Heusler compounds, spinels, and perovskites, many possess an electronic structure that enables the creation of materials with potential spintronic applications (referred to in the literature as Half-Metallic Ferromagnets or Spin Gapless Semiconductors). These types of materials often exhibit favorable thermoelectric or magnetocaloric properties. Various methods of data aggregation and analysis may also allow for the discovery of new rules and patterns based on the results of systematic DFT calculations. In the subject literature, the magnetic properties of Heusler compounds are generally explained by the simple Slater-Pauling rule. Based on the results of my previous systematic DFT calculations, I consider this an oversimplification. Here too, an analysis of the processes governing magnetism and the</p>





właściwości może dostarczyć wielu nowych wyników.	influence of structure on these properties may yield many new results.
<b>Opis wymagań – wiedza, umiejętności i kompetencje społeczne kandydata</b> Ogólna wiedza z fizyki ciała stałego/inżynierii materiałowej/chemii. Znajomość linuxa i skryptów basha będzie pomocna w przypadku bardziej teoretycznych badań.	<b>Description of requirements – knowledge, skills and social competences of the candidate</b> General solid state physics/materials science/chemistry knowledge. Knowledge of Linux and bash scripting will be helpful in case of more theoretical approach.

