

Rezumat pentru raport anual Program Nucleu

Titlu Faza: **Competitia dintre localizarea polaronica si conductivitate in oxizi de mangan**

Obiective: **Stabilirea legaturii dintre dopaj si taria cuplajului electron-fonon**

Rezultate estimate initial:

- stabilirea semnaturii in spectrele de fotoemisie a tranzitiei de la izolator la metal in CCMO in functie de dopajul cu Ce
- obtinerea experimentală a legilor de dispersie $E(k)$ pentru LSMO si CCMO in ARPES
- identificarea energiilor modurilor de vibratie active in cuplajul electron fonon din legile de dispersie obtinute experimental
- modificarea polarizării orbitale si a cuplajului electron fonon in functie de tensiunea indusa de substrat in cresterea epitaxiala

Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele):

Doparea CaMnO_3 - CMO cu doar 2% Ce (2CCMO) produce tranzitia de la starea de izolator cu ordonare antiferomagnetica la cea metalica, in timp ce doparea cu 4% Ce (4CCMO) creste si mai mult concentratia de purtatori liberi, fiecare atom de Ce transferand cate doi electroni fiecarei celule unitate de CMO. Avantajul dopajului mic consta in izolarea exclusiva a mecanismului electronic de tranzitie de la izolator la metal, fara a induce efecte suplimentare de deformare a retelei cristaline asociate cu dopajul mai ridicat, necesar tranzitiei catre starea metalica in cazul mult mai cunoscut al LaMnO_3 dopat cu Sr in proportie de 30% (LSMO).

Legile de dispersie electronice obtinute in experimente de fotoemisie de raze X moi cu rezolutie unghiulara pentru 2CCMO si 4CCMO sunt prezentate in Fig. 1 a-g si indica cum in mod evident dopajul cu Ce se reflecta intr-un vector de unda Fermi - k_F mai mare, care in virtutea relatiei cu concentratia de purtatori $n \sim k_F^3$, conduce la concluzia ca intr-adevar are loc o dublare a densitatii de purtatori liberi in cazul 4CCMO comparativ cu 2CCMO. Calculele de structura electronica indica mecanismul de tranzitie ca fiind umplerea graduala a benzilor din jurul punctului Γ al spatiului k (Fig. 1c). Acestea sunt de fapt-un amestec de stari cu simetrie $e_g(x^2-y^2)$ si $(3z^2-r^2)$. Un aspect remarcabil este faptul ca tranzitia la starea metalica incipienta - 2CCMO transleaza

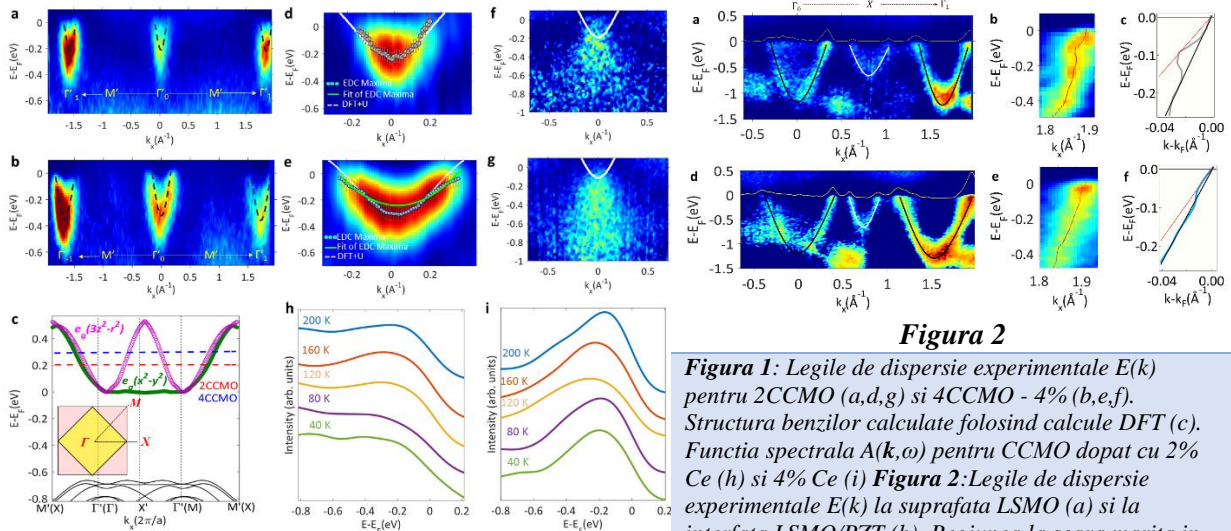


Figura 1

Figura 2

Figura 1: Legile de dispersie experimentale $E(k)$ pentru 2CCMO (a,d,g) si 4CCMO - 4% (b,e,f). Structura benzilor calculate folosind calcule DFT (c). Functia spectrala $A(k,\omega)$ pentru CCMO dopat cu 2% Ce (h) si 4% Ce (i) Figura 2: Legile de dispersie experimentale $E(k)$ la suprafata LSMO (a) si la interfata LSMO/PZT (b). Regiunea la scara marita in jurul punctului Γ la suprafata (b) si interfata (e), si renormalizarea diferita a dispersiilor $E(k)$ pentru cele doua cazuri (c,f)

nivelul Fermi in banda de conductie, insa purtatorii liberi sunt puternic cuplati cu fononii, conducand la o crestere a masei efective a electronilor. Aceasta situatie corespunde unei mobilitati mici. Cresterea concentratiei de purtatori liberi permite ecranarea interactiei dintre electroni si fononi, la trecerea din regimul de cuplaj puternic cu fononi in cel slab/intermediar si cresterea mobilitatii, insotita de tranzitia catre ordonarea feromagnetica. Mecanismul identificat pentru tranzitia dintre regimul de cuplaj puternic spre cel slab/intermediar consta in violarea teoremei Migdal care permite neglijarea termenilor de ordin superior din dezvoltarea in serie a interactiei electron fonon atunci cand energia electronilor este mult mai mare decat cea a fononilor. In cazul CCMO, minimul benzii de conductie este comparabil cu energia fononilor din CCMO (50-70 meV), caz in care trebuiesc luati in considerare si termenii de ordin superior in taria interactiei. Acest fapt duce la aparitiei semnaturii specifice in imaginile ARPES (Fig. 1f,g) sub forma intensitatii localizate in \mathbf{k} , limitata la regiunea definita de k_F – foarte intensa in cazul 2CCMO si tot mai putin vizibila pe masura ce creste densitatea de purtatori.

Situatia identificata in cazul LSMO ($x=0.3$) (Fig 2. a,d) este radical diferita deoarece minimul benzii de conductie este mult mai mare decat energia fononilor, care, cu valori in intervalul 30-80 meV este comparabila cu cazul CCMO. Pentru LSMO, cuplajul electron-fonon este bine descris de aproximatia Migdal iar semnatura interactiei electron fonon se manifesta doar ca abatere de la dispersia parabolica a benzilor electronice in vecinatatea energiei Fermi (eng. *kink*). Energia la care apare aceasta abatere este cea a fononului implicat in cuplajul electron-fonon. Abaterea de la dispersia parabolica este cuantificata de parametrul $\lambda = v_F/v_F^*$, unde v_F si v_F^* reprezinta vitezele Fermi ale benzii electronice parabolice, respectiv renormalizata, deduse dintr-un fit linear al dispersiei benzii electronice in vecinatatea energiei Fermi. Mai departe, aceasta se propaga in modificarea masei efective a purtatorilor data de relatia $m_{eff}/m_{eff}^*=1+\lambda$, cu m_{eff} – masa efectiva a electronilor din banda parabolica considerata iar m_{eff}^* – masa renormalizata datorita interactiei electron - fonon.

In cazul LSMO, valoarea parametrului λ de ~ 0.9 indica o crestere a masei efective datorita interactiei cu fononii de tip Jahn-Teller din regiunea 60-70 meV, cauzati de stresul cresterii epitaxiale pe substratul SrTiO₃ cu constanta de retea mai mare decat a LSMO (Fig. 2 b.c).

O modalitate de a controla cuplajul cu fononii este, asa cum am dedus in cazul CCMO, modificarea concentratiei de purtatori. Am realizat acest fapt prin alaturarea LSMO cu un feroelectric (PZT) cu o directie a polarizarii feroelectrice orientata catre LSMO. Compensarea starii feroelectrice se realizeaza prin intermediul electronilor din LSMO, care tind sa se acumuleze spre interfata, echivaland cu un dopaj de tip *n* in regiunea interfetei. Intr-adevar, cresterea densitati de purtatori este semnalata de cresterea k_F (Fig. 2d), avand drept consecinta slabirea interactiei cu vibratiile retelei, si un factor de renormalizare $\lambda \sim 0.3$ (Fig. 2f). Presupunand aceleasi valori pentru timpzii de imprastiere a electronilor, deducem o crestere a mobilitatii la interfata cu un factor de 2 comparativ cu suprafata libera.

Concluzii si perspective: Am evidentiat o modalitate de a controla mobilitatea in oxizii metalelor de tranzitie prin modularea concentratiei de purtatori. Modificarea concentratiei de purtatori poate fi controlata atat printr-un control explicit al dopajului, cat si prin exploatarea efectelor de la interfata cu feroelectricii. Rezultatele previzionate initial au fost obtinute iar obiectivul fazei realizat integral. Manuscrisul redactat in baza acestor rezultate este finalizat si va fi trimis spre publicare la un jurnal de mare vizibilitate.