

Název práce: Tenké vrstvy na bázi uranu: elektronová struktura a fyzikální vlastnosti

Autor: Oleksandra Koloskova

Katedra / Ústav: Katedra fyziky kondenzovaných látek

Vedoucí doktorské práce: Doc. RNDr. Ladislav Havela, CSc.

Abstrakt: Tato práce se zabývá studiem tenkých vrstev na bázi uranu deponovaných pomocí DC naprašování, které umožňuje změny v kompozici a mikrostruktuře a zkoumání pomocí fotoelektronové spektroskopie. Předmětem studia jsou slitiny U-Mo a U-Zr, uranové hydridy (UH_3 and UH_2) a uranové hydridy se substitucí Zr/Mo.

Nejprve byla provedena *in-situ* analýza a poté *ex-situ* analýzy struktury a magnetických a transportních vlastností. Navzdory supravodivému stavu U-T slitin, pouze jeden film ($\text{U}_{0.92}\text{Mo}_{0.08}$) supravodivost vykazuje, a to s přechodem při teplotě 0,55 K.

Všechny hydridy jsou ferromagnetické, přičemž jejich Curieovy teploty se pohybují kolem 120 K pro UH_2 a 170 K pro α - a β - UH_3 . Tento ferromagnetismus je robustní a nezávislý na strukturních detailech. Variací parametrů naprašování můžeme získat UH_2 (který se v bulku nevyskytuje), β - UH_3 , nebo koexistenci UH_2 and α - UH_3 . Inkluze atomů vodíku drasticky ovlivňuje vlastnosti. Konkrétně mění paramagnetické slitiny na ferromagnetické hydridy, a pro feromagnetismus je zde velmi důležitá U-H polární vazba. Pásově ferromagnetická povaha UH_3 byla objasněna porovnáním DMFT výpočtů se spektry XPS a UPS. Tato spektra vykazují finální stav s rysy $5f^2$ multipletu a výrazné electron-elektronové korelace.

Substituce Zr v hydridových filmech stabilizovala UH_2 místo očekávané fáze α - UH_3 . Série $(\text{UH}_3)_{1-x}\text{Mo}_x$, $(\text{UH}_3)_{1-x}\text{Zr}_x$ a $(\text{UH}_2)_{1-x}\text{Zr}_x$ mají nižší Curieovy teploty než jejich bulkové verze a čisté UH_2 či UH_3 filmy. Tento pokles je připsán destabilizaci atomů vodíku v krystalové struktuře, která je způsobena zahrnutím přechodových kovů a kinetickou energií z depozičního procesu.

Klíčová slova: Tenké vrstvy, Uran, Supravodivost, Hydrid, Elektronická Struktura, Magnetismus