

TEORIE KONDENZOVANÝCH SYSTÉMŮ

Václav Janiš, Jan Mašek, Bedřich Velický

Z HISTORIE

Historie teoretického studia kondenzovaných látek sahá až k začátkům jak Fyzikálního ústavu AV ČR, tak Ústavu fyziky pevných látek. Jeho jádrem se staly dvě skupiny založené kdysi Emilem Antončíkem a Miroslavem Trlifajem. Ti, inspirovaní svým učitelem Zdeňkem Matyášem, prosadili u nás již od 50. let moderní zaměření ve výzkumu pevných látek, podle kterého uspořádání atomů v pevné látce a mikroskopické chování jejich valenčních elektronů v konečném efektu určují makroskopické vlastnosti látek. Tato koncepce odpovídala světovému vývoji a během druhé poloviny minulého století byla úsilím četných teoretiků v celém světě do značné míry realizována. Teoretičtí fyzikové, kteří v r. 1979 vstupovali do nově vytvořeného teoretického oddělení Sekce fyziky kondenzovaných látek, se na tomto úsilí aktivně podíleli a byli velmi dobře připraveni je dále rozvíjet.

Po následujících deset let bylo teoretické oddělení neformálním centrem teorie kondenzovaných systémů nejen v ústavu a v Akademii věd ČR, ale po zrušení Katedry teoretické fyziky na Univerzitě Karlově v Československu vůbec. Metody a obsahová problematika výzkumu vycházely zprvu ze zkušeností kmenových pracovníků, kteří stáli u zrodu oddělení. S příchodem nových mladších vědeckých pracovníků a pod vlivem impulsů získaných z dlouhodobých kontaktů s našimi i zahraničními pracovišti byly osvědčené metody obohaceny také o nové moderní postupy a současně byla významně rozšířena oblast vědecké orientace oddělení.

HLAVNÍ CÍL: MIKROSKOPICKÁ TEORIE KONDENZOVANÝCH SYSTÉMŮ

Vědecké zaměření teoretického oddělení postupně vykristalizovalo do obecného zájmu o ucelený mikroskopický popis elektronových a atomových vlastností kondenzovaných soustav, především pak systémů s netriviální strukturou, narušenou symetrií nebo v extrémních podmínkách a to jak ve stavu termodynamické rovnováhy, tak i mimo ni. Moderní vývoj v teorii chování elektronů v kondenzovaných systémech vede ke zvláštní dvojkolejnosti. Na jedné straně jde o fundamentální teorii elektronových a atomárních procesů vedenou často na modelové úrovni. Na druhé straně se prosazují aplikace základní teorie ve sféře materiálového výzkumu, který vyžaduje realistické výpočty pro konkrétní systémy.

Ke studiu mikroskopických vlastností látek jsou tak využívány jednak metody vycházející z rovnovážné a nerovnovážné statistické fyziky, formalismu mnohočásticových Greenových funkcí, jednak techniky masivních výpočtů elektronové struktury a numerických simulací. Základní výhodou teoretického oddělení od začátku bylo, že se v něm oba tyto přístupy tradičně rozvíjely souběžně ruku v ruce a navzájem se podporovaly. To je něco, co i ve světě často chybí.

ELEKTRONOVÁ STRUKTURA PEVNÝCH LÁTEK Z PRVNÍCH PRINCIPŮ

Pro pochopení makroskopických vlastností pevných látek je v první řadě nezbytná důkladná a spolehlivá znalost elektronové struktury. Proto je největší část vědecké kapacity oddělení věnována právě studiu elektronových vlastností kondenzovaných látek. Především jde o určení elektronových struktur z prvních principů kvantové teorie, tj. pouze na základě chemického složení a atomové struktury bez použití volitelných parametrů. Obecným nástrojem je popis chování elektronů založený na teorii funkcionalu hustoty.

POČÍTAČOVÁ FYZIKA KONDENZOVANÝCH SOUSTAV

Globálním metodickým cílem studia elektronových struktur je vyvinutí široce použitelných numerických programů pro jejich výpočet. Na studiu elektronových struktur látek se celosvětově podílí mnoho pracovišť (UC Davis, Rutgers, Daresbury, Uppsala, Vídeň, Berlín, Jülich, Drážďany, Praha, Brno...), která v Evropě tvoří síť Psik. Teoretické oddělení je jedním z uzlů této sítě. Je vybaveno špičkovými počítači a aktivně se účastní na spolupráci uvnitř této sítě. Např. V. Drchal a hlavně A. Shick vytvořili mezinárodně uznávaný balík programů započítávající kinematické relativistické korekce v elektronových strukturách, F. Máca pak modifikoval programy pro výpočet elektronových struktur na povrchích kovů. Výpočty elektronových struktur dnes překračují rámec teorie kondenzovaných soustav a staly se multidisciplinárním oborem spojujícím kvantovou chemii, krystalografii, kvantovou mechaniku elektronových stavů, teorii elektronových korelací a statistickou fyziku a současně s tím i moderní numerické a programovací metody. Tomuto oboru se dostalo názvu počítačová fyzika kondenzovaných soustav.

V teoretickém oddělení se podařilo obohatit výpočetní metody pevných látek několika zásadními příspěvky. Především názorná a jednoduchá metoda těsné vazby byla povýšena úsilím B. Velického, J. Maška a J. Kudrnovského z modelové úrovně na účinný postup realistických výpočtů. To umožnilo popis velmi složitých, jinými metodami nedostupných materiálů. Právě v dlouhodobé systematické aplikaci metody těsné vazby na realistické výpočty si pracovníci teoretického oddělení vydobyli mezinárodní věhlas a uznání.

NEUSPOŘÁDANOST: VLIV NÁHODNOSTI NA ATOMÁRNÍ ÚROVNI

Teorie kondenzovaných soustav vychází sice z potřeb popisu konkrétních materiálů, její rozvoj je však nesen vytvářením obecných koncepcí, které vedou nejen k popisu, ale i k objasnění samotné podstaty zkoumaných jevů. Tradiční oblastí zájmu teoretického oddělení jsou neuspořádané pevné látky, reprezentované amorfními materiály, směsnými krystaly a slitinami. Zásadně nové univerzální jevy, které se zde oproti krystalickým látkám objevují, jsou například: kvantová koherence během rozptylů elektronů na příměsích, difusní transport náboje a tzv. Andersonova lokalizace. Jednou z obecných koncepcí, které se v oblasti neuspořádaných látek prosadily, je přiblížení středního pole, nazývané zde přiblížením koherentního potenciálu (CPA). B. Velický je jedním z otců této metody a jeho práce z konce šedesátých let [B. Velický, S. Kirkpatrick, H. Ehrenreich, Phys. Rev. **175**, 747 (1968), B. Velický, Phys. Rev. **184**, 614 (1969)] dosáhly každá více než tisíc citačních ohlasů. B. Velický společně se svými studenty a spolupracovníky, J. Kudrnovským, V. Drchalem a J. Maškem, pak úspěšně po řadu let aplikovali koherentní potenciál na popis spektrálních a transportních vlastností objemových materiálů, povrchů, rozhraní a multivrstev náhodných slitin kovů a polovodičů.

Nedostatkem metody CPA však je, že vícečásticové korelace nemohou být započteny spolehlivě a pro popis např. transportních vlastností v silně neuspořádaných látkách je nutné vyjít za rámec CPA a započíst fluktuace nestejně rozložené v krystalické mřížce. V. Janišovi se podařilo systematickou konstrukcí vrcholových korekcí k elektrické vodivosti CPA vytvořit novou metodiku výpočtu transportních vlastností neuspořádaných systémů [V. Janiš, Phys. Rev. B **64**, 115115 (2001)].

PEVNÁ LÁTKA A TEORIE KVANTOVÝCH POLÍ

Kondenzované systémy jsou obrovské soubory interagujících částic. Proto odedávna bylo lákavou ideou nahlížet na ně jako na soustavu vázaných

kvantových polí a popisovat je aparátem kvantové teorie pole, tj. Feynmanovými diagramy, Greenovými funkcemi apod. Pevná látka se pak popisuje značně zjednodušenými univerzálními modely, které umožňují téměř přesná nebo velice spolehlivá analyticko-numerická řešení. Na této modelové úrovni se v teoretickém oddělení podařilo nejprve B. Velickému a J. Maškovi rozšířit metodu koherentního potenciálu z náhodných slitin na výpočet elektronových struktur silně interagujících elektronů v rámci tzv. slitinové analogie. Zobecnění přiblížení koherentního potenciálu pak kulminovalo v pracích V. Janíše, které přispěly k vytvoření dnes velmi populární dynamické teorie středního pole. Jedná se o nejpřesnější lokální přiblížení v systémech s interagujícími a neuspořádanými elektrony. Dynamická teorie středního pole byla mezitím rozšířena z modelových situací na realistické výpočty elektronových struktur. V. Drchal, V. Janiš a J. Kudrnovský navrhli jedno z prvních schémat odhadu vlivu dynamických korekcí k prvoprincipiální metodě funkcionálu hustoty pro silně interagující a neuspořádané elektronové systémy využitím postupů dynamické teorie středního pole [V. Drchal, V. Janiš, J. Kudrnovský, Phys. Rev. B **60**, 15664 (1999)].

AKTUÁLNÍ TÉMA: SPOJENÍ POLOVODIČOVÝCH A MAGNETICKÝCH VLASTNOSTÍ

Systémy, v nichž neuspořádanost a interakce elektronů hrají rozhodující roli pro určení elektronových struktur, jsou zředěné magnetické polovodiče (DMS), např. $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ nebo $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. Mikroskopická teorie DMS dlouhodobě rozvíjená v teoretickém oddělení J. Maškem a nyní také F. Mácou, J. Kudrnovským a V. Drchalem je založena na kombinaci přiblížení statistického středního pole a koherentního potenciálu a realistických, těsnovazebních nebo alternativně prvoprincipiálních výpočtů. Toto zkoumání a jeho výsledky mají zásadní význam nejen pro testování platnosti v praxi často používaných fenomenologických modelů magnetických polovodičů, ale i pro konkrétní materiálový a aplikační výzkum.

SPINTRONIKA: KANDIDÁT BUDOUCÍCH NOBELOVÝCH CEN

Elektrony jsou nosiči nejen elektrického náboje, ale i spinu, magnetického momentu, a proto na ně lze silově působit magnetickým polem. To je základní myšlenka tzv. spintroniky (magnetoelektroniky). Důležitým systémem pro technologické aplikace jsou magnetické multivrstvy, v nichž se střídají magnetické a nemagnetické vrstvy atomární tloušťky. Ukazuje se, že elektrický odpor multivrstvy lze

i poměrně slabým vnějším magnetickým polem změnit až o desítky procent. Tento jev se nazývá gigantická magnetorezistence. Využívá se např. při konstrukci čtecích hlav disků pro počítače, slouží v senzorech magnetického pole, umožňuje přesnou detekci polohy otáčejících se částí, např. v rozdělovačích automobilových motorů nebo u brzd ABS.

V teoretickém oddělení řeší V. Drchal a J. Kudrnovský tři hlavní oblasti problematiky spojené s magnetickými multivrstvami. Jsou to určení magnetického stavu konkrétní multivrstvy, výpočet elektrického odporu multivrstvy v závislosti na jejím složení, geometrii a magnetickém stavu a určení kritické teploty, nad níž multivrstva ztrácí své magnetické vlastnosti.

NANOSKOPICKÉ PRVKY PRO ELEKTRONIKU BUDOUCNOSTI

S rozvojem techniky přípravy polovodičových materiálů postupovala ve světě miniaturizace integrovaných prvků pro mikroelektroniku. Po období tzv. mezoskopických, submikronových elektronických prvků (jako jsou např. kvantové jámy a kvantové dráty) směřuje dnešní úsilí k rozměrům součástí kolem desítek nanometrů (10^{-9} m). Motivací pro takové úsilí je nejen miniaturizace mikroelektronických obvodů, ale i nová oblast tzv. kvantového počítání a kvantových počítačů. Objektem experimentálního i teoretického zájmu se stala tzv. kvantová tečka. Můžeme si ji představit jako malou oblast v polovodiči, která může mít rozměry například 25 nanometrů, ve které je elektron vázán určitou bariérou. K. Král zkoumá chování elektronů v agregátech kvantových teček při srážkách s kmity atomů mřížky polovodiče. Podařilo se mu např. vysvětlit otázku, proč se elektrony v kvantových tečkách v polárních polovodičích chladí velmi rychle [K. Král, Z. Khás, Phys. Rev. B **57**, R2061 (1998)].

DYNAMIKA DALEKO OD TEPELNÉ ROVNOVÁHY

Většina makroskopických jevů je projevem rovnovážných vlastností pevných látek. Moderní experimentální metody však dnes umožňují sledovat chování látek na mikroskopických délkových škálách a na velmi krátkých časových úsecích a jsou tedy použitelné i pro sledování významných dějů poměrně daleko od termodynamické rovnováhy. Této situaci se přizpůsobuje i badatelská aktivita teoretického oddělení. B. Velický a A. Kalvová zkoumají dlouhodobě pomocí nerovnovážných Greenových funkcí relaxace elektronového plynu v polovodičích excitovaných velmi krátkými světelnými pulsy.

Nerovnovážná fyzika má zajímavé aplikace i na klasické úrovni, kde kvantové fluktuační jevy jsou zanedbatelné. To lze předpokládat např. tehdy, když základními částicemi nejsou elektrony, ale atomy. Typickým příkladem klasické dynamiky mnohoatomových systémů je časový vývoj povrchů a rozhraní. V současnosti je v centru pozornosti nalezení a pochopení mikroskopických mechanismů růstu definovaných povrchových struktur. Cílem je na jedné straně vysvětlit výsledky experimentů s atomárním rozlišením (rastrovací tunelový mikroskop, polní iontový mikroskop atd.), na druhé straně objasnění obecných zákonitostí. M. Kotrla studuje obě stránky problému, přičemž používá kombinace numerických simulací a analytických výpočtů. Např. analýzou různých možných typů dynamického chování (určování tzv. dynamických tříd univerzality) se podařilo M. Kotrlovi přispět k objasnění tzv. self-afinního růstu, kdy profil povrchu má fraktální charakter.

GEOMETRIE ATOMOVÝCH USPOŘÁDÁNÍ A JEJÍ VZNIK

Uspořádání atomů v pevné látce může být daleko složitější, než uvažuje klasická krystalografie. Jednou otázkou je systematické třídění možných subperiodických struktur, jako jsou povrchy krystalů, doménové a dendritické struktury. Tento směr bádání byl v teoretickém oddělení systematicky rozvíjen V. Kopským a J. Fuksou a toto úsilí bylo korunováno významným úspěchem. Mezinárodní krystalografická unie svědila vytvoření 5. dílu Mezinárodních krystalografických tabulek o subperiodických grupách V. Kopskému. Tabulky vyšly v roce 2002 v nakladatelství Kluwer-Academic.

INTERDISCIPLINÁRNÍ OBORY: BIOFYZIKA A EKONOFYZIKA

Biofyzika využívající fyzikální metody v biologii již několik desítek let pomáhá biologům. Relativní novinkou je však fyzikální modelování biologické evoluce. F. Slanina a M. Kotrla vytvořili model dynamicky proměnné ekologie, kde se studuje evoluce sítě vzájemných vazeb mezi jednotlivými druhy [F. Slanina, M. Kotrla, Phys. Rev. Lett. **83**, 5587 (1999)]. Model úspěšně popisuje strukturu ekologické sítě, která odpovídá empirickým výzkumům. Dokáže také reprodukovat, přinejmenším kvalitativně, náhlé ekologické kolapsy provázené rozsáhlým vymíráním, jako bylo ono nejznámější vymizení dinosaurů před 65 miliony let. Ve skutečnosti však takovýchto událostí bylo v geologické minulosti tak velké množství, že je možné provést jejich statistickou analýzu. Ta naznačuje, že ekosystémy jsou pravděpodobně v samoorganizovaném kritickém stavu, tedy jako by se samy dokázaly trvale udržovat

v bodě fázového přechodu. Tento rys empirických dat je reprodukován také v našem modelu evoluce.

Biologií však interdisciplinární aplikace teoretické fyziky nekončí. Ekono-fyzika se zabývá aplikacemi fyziky v ekonomickém a finančním modelování. Zhruba od roku 1997 jsme svědky velké módní vlny, kdy se teoretičtí fyzikové mnoha různých specializací začínají věnovat ekonomickému modelování. F. Slanina se v teoretickém oddělení soustřeďuje na „mikroskopické“ modelování ekonomické aktivity,

kde jednotlivé „částice“, čili ekonomičtí agenti, reagují podle určitého poměrně jednoduchého schématu. Zkoumá, jak se jednotliví agenti dokáží velmi komplikovaným způsobem adaptovat na přítomnost ostatních agentů, čili fyzikálním jazykem, vytváří vysoce netriviální mnohočásticový korelovaný stav. Metodika a matematický aparát se zde z velké části přebírá ze statistické teorie středního pole spinových skel a jiných neuspořádaných frustrovaných systémů.

PŘÍPRAVA NOVÝCH MATERIÁLŮ

Pavel Boháček

Pro přípravu nových materiálů, zejména monokrystalů, a pro chemickou analýzu materiálů v ústavu studovaných bylo ve Fyzikálním ústavu ČSAV založeno v roce 1955 chemické oddělení.

Přípravou monokrystalů se v oddělení začal zabývat od roku 1957 Zdeněk Hauptman. Zaměřil se na tehdy se rozvíjející metodu pěstování monokrystalů prostřednictvím chemického transportu v uzavřených ampulích, zabýval se studiem transportu oxidů železa a titanu. Značný ohlas vzbudila jeho práce o přípravě monokrystalů magnetitu (Fe_3O_4), která se stala východiskem mezinárodní spolupráce zaměřené k aplikačně významným feritům. Pozoruhodným výsledkem byla příprava tzv. dvoudimenzionálních whiskerů (tenkých pravoúhle ohraničených destiček) α - železa, jejichž dokonalou vnitřní strukturu potvrdily studie magnetických domén a feromagnetické rezonance [M. Kotrbová, Z. Hauptman a kol., IEEE Trans. Magn., MAG-2, 511 (1966)]. Z. Hauptman též inicioval a spolu se S. Vepřekem z oddělení výbojů v plynech vypracovali studii transportu materiálu prostřednictvím nízkoteplotního plazmatu, což byla průkopnická práce později intenzivně rozvíjeného oboru zaměřeného k přípravě tenkých vrstev [S. Vepřek, Z. Hauptman, Z. anorg. allg. Chem. **359**, 313 (1968)]. K tomu poznamenejme, že oba autoři odešli v roce 1968 na univerzitní pracoviště v západní Evropě.

Souběžně s pěstováním monokrystalů byla rozvíjena chemická analýza. Byla vypracována a publikována celá řada nových analytických postupů. Jedním z ucelených přínosů byla metoda stanovení kyslíkové nestechiometrie oxidických materiálů založená na detekci změny koncentrací železnatých a železitých iontů v roztoku, do něhož je rozpuštěna analyzovaná látka. Autor metody Josef Novák se podílel spolu s kolegy z oddělení dielektrik na celé řadě dodnes citovaných studií věnovaných feroelek-

trickým materiálům, zejména titaničitanu barnatému [J. Novák, H. Arend, J. Amer. Ceram. Soc. **47**, 53 (1964)]. S úspěchem byla metoda užívána též v devadesátých letech při analýze nově objevených vysokoteplotních supravodičů, u nichž na obsahu nadstechiometrického kyslíku závisí teplota supravodivého přechodu [Z. Málková, J. Novák a kol, Fresenius J. Anal. Chem. **347**, 478 (1993)].

Další metodou užívanou v oddělení k přípravě monokrystalů bylo pěstování krystalů z cizích tavenin (dnes se více užívá termín vysokoteplotní roztoky). Maryna Kotrbová touto metodou pěstovala monokrystal FeBO₃, průhledného feromag-



1/ Monokrystal GGG, ϕ 2 cm