

## Teoria kwantowej krytyczności na powierzchni

Fizyka ciał stałych jest pełna niespodzianek. Dla przykładu, matematyczny opis kryształów metali zupełnie pomijający elektrostatyczne oddziaływanie elektronów (tzw. model Drudego) daje w wielu aspektach jakościowo zgodne z rzeczywistością przewidywania dotyczące ich własności. Sformułowany jeszcze przed II Wojną Światową model Sommerfelda, który wprowadził do modelu Drudego poprawki wynikające z powstałej w międzyczasie teorii kwantowej (ale nadal ignorował wszelkie elektrostatyczne oddziaływania elektronów), opisuje zwykłe metale tak dobrze, że bywa stosowany do dziś. Te zaskakująco poprawne wyniki tak prostych modeli dają się częściowo wyjaśnić tym, że wewnątrz metalu ładunki elektryczne łatwo się przemieszczają, i w praktyce ładunek elektryczny danego elektronu jest ekranowany przez pozostałe elektrony.

Model Drudego-Sommerfelda pozwolił zrozumieć wiele własności zwykłych metali, ale nie wszystkie materiały można tak prosto opisać. Za przykład mogą posłużyć warstwowe stopy zawierające atomy ziem rzadkich. W ich przypadku trzeba uwzględnić w opisie oddziaływanie elektronów. W dotychczasowych teoriach często osiąga się to w ramach przybliżonego schematu obliczeniowego nazywanego *teorią dynamicznego pola średniego* lub (na podstawie angielskiego akronimu) *DMFT*. Pozwala on na obliczenia własności poszczególnych materiałów, a także na jakościowe zrozumienie wyników w ramach uproszczonych modeli.

Jednym z wniosków z DMFT oraz badań eksperymentalnych jest obserwacja, że materiały mają tendencję do wykazywania najbardziej niezwykłych własności w punkcie na pograniczu dwóch bardziej typowych faz. Kiedy to przejście fazowe jest spowodowane czynnikiem innym niż temperatura, np. polem magnetycznym lub zmianą składu chemicznego, nosi nazwę *kwantowego przejścia fazowego*, z powodu kluczowej roli odgrywanej przez fluktuacje kwantowe. Wiele spośród nadprzewodników wysokotemperaturowych to przykłady faz ustabilizowanych przez bliskość kwantowych przejść fazowych lub krótko przez *kwantową krytyczność*.

Istotnym wyzwaniem dla budowy modeli opartych na teorii dynamicznego pola średniego są występujące w materiałach nieregularności. Szczególnie ważnym przykładem takiej nieregularności jest powierzchnia materiału, na której otoczenie atomów jest oczywiście inne, niż tych położonych wewnątrz. Zrozumienie zjawisk zachodzących na powierzchniach wymaga dodatkowego wysiłku. Ostatnie pomiary na próbkach rutenianu strontu za pomocą skaningowego mikroskopu tunelowego wykazały, że ich powierzchnie mają zupełnie inne własności niż wnętrze. W warunkach, w których wnętrze jest zwykłym metalem, powierzchnia wykazuje uporządkowanie magnetyczne i anizotropię – tak, że przypomina wnętrze w stanie kwantowej krytyczności powodowanej przez przyłożenie silnego pola magnetycznego. To sugeruje, że kwantowa krytyczność bywa łatwiejsza do zrealizowania na powierzchni, niż we wnętrzu, otwierając nowe możliwości projektowania materiałów o uprzednio niedostępnych własnościach.

W ramach niniejszego projektu zaproponowano rozwinięcie teorii DMFT powierzchni oddziałującego materiału warstwowego, zweryfikowanie jej przez porównanie z wynikami eksperymentów dotyczących rutenianu strontu, a następnie użycie do przewidzenia całościowego diagramu fazowego powierzchni tego materiału. Taka teoria pozwoli także lepiej zrozumieć istniejące dane doświadczalne i może pomóc wyznaczyć kierunki dalszych badań w zakresie projektowania materiałów, jak również będzie miała zastosowanie do wielu innych materiałów.