

Fyzikální základy materiálů

Jak vnitřek ovlivňuje vnější chování

Ondřej Šipr

Fyzikální ústav Akademie věd České republiky, Praha
<http://www.fzu.cz/~sipr>

Univerzita třetího věku

Fyzika pro nefyziky

Trója, 17. prosince 2018

Osnova

Jak modelovat materiály: mnoho škál - fyzikova smrt?

Jak si poradit s 10^{23} elektrony

K čemu to (už teď) dobré jest

Osnova

Jak modelovat materiály: mnoho škál - fyzikova smrt?

Jak si poradit s 10^{23} elektrony

K čemu to (už teď) dobré jest

Jak popsat vlastnosti materiálu

- ▶ Vlastnosti na různých škálách popisujeme různým způsobem (nejen materiálů).
- ▶ Typické “školní” vlastnosti (tuhost, tepelná roztažitelnost) popisujeme jako vlastnosti **spojitého** prostředí (“plástev medu”).
 - ▶ Inženýrství — strojařina.
- ▶ Co je pod kapotou: **diskrétní prostředí** (atomová jádra, elektrony — “nabitě kuličky”).
 - ▶ Fyzika pevných látek.
- ▶ Překlenout mezeru mezi spojitym a diskrétním popisem: Jak ze zákonů mikrosvěta dostat makroskopické vlastnosti?

Ab-initio popis

Popis z prvních principů — **ab-initio**.

~~Trh vše vyřeší.~~

Coulombův zákon vše vyřeší:

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{r^2} .$$

& **kvantová mechanika**:

Elektron není zelená kulička s nápisem minus na zádech, elektron je vlna (s nápisem minus na zádech).

Co to je, když se řekne kvantová mechanika

Vlny místo kulečnickových koulí.

Za roh nevidíme, ale slyšíme.

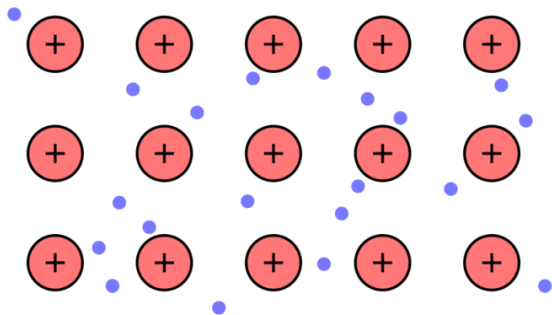
Kvantový volejbalový míč může někdy přeletět síť, i když nemá dostatečnou výšku.

Vlnová rovnice:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) .$$

Popisujeme pevnou látku (“kus hmoty”)

Atomová jádra a elektronové lepidlo mezi nimi.



courses.lumenlearning.com

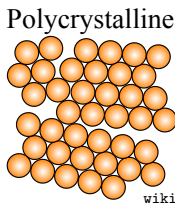
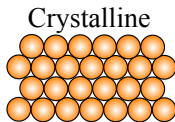
Vlastnosti elektronového lepidla určují (do značné míry) vlastnosti pevné látky.

Co je to ta “pevná látka”?

Při mikroskopickém popisu se zaměřujeme (téměř vždy) na krystaly, tedy látky s pravidleným uspořádáním atomů.

Reálný svět je složen z polykrystalů (neživá hmota) a polymerů (živá hmota).

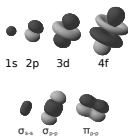
Řekne-li pevnolátník “pevná látka”, má skoro určitě na mysli monokrystal.



Mezeru mezi monokrystalem a reálným světem překlene multiškálové modelování.

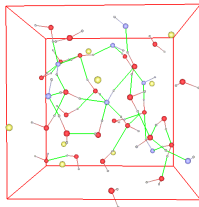
Multiškálové modelování

- ▶ Kvantová mechanika



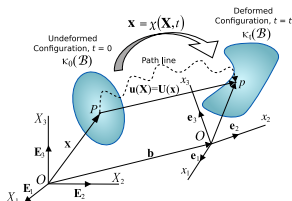
wikimedia.org

- ▶ Klasická molekulární dynamika



nyu.edu

- ▶ Mechanika kontinua — spojitéch systémech



wikimedia.org

Poručíme materiálům ...

Svatý grál: Navrhovat **materiály požadovaných vlastností**.

- ▶ Strojař: Zná zákony páky, nakloněné roviny, kola na hřídeli.
 - ▶ Na základě těchto znalostí — stavebních kamenů — vymyslí, jak sestrojít stroj, který bude dělat to, co po něm chceme.
- ▶ Materiálový inženýr: Zná zákony kvantové mechaniky a ví, jakými vnitřními mechanismy z nich plyne, že něco je tuhé, něco průhledné, něco magnetické.
 - ▶ Na základě těchto znalostí (a s pomocí obrovského počítače) navrhne, jak smíchat dohromady jednotlivé prvky tak, aby vzniknul materiál požadovaných vlastností.

Osnova

Jak modelovat materiály: mnoho škál - fyzikova smrt?

Jak si poradit s 10^{23} elektrony

K čemu to (už teď) dobré jest

S čím se potýkáme

Typická meziatomové vzdálenost: 2 Å

Pro spolehlivý popis vlastností kusu hmoty potřebujeme zahrnout alespoň 50 atomů v jednom směru (10 nm).

Atom má zhruba třicet elektronů.

Potřebujeme kvantově-mechanicky popsat

$50^3 \times 30 \sim 4 \times 10^6$ elektronů.

Schrödingerova rovnice pro 4×10^6 elektronů

$$\hat{T}\Psi + \hat{V}\Psi = E\Psi$$

$$\Psi = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{4 \times 10^6})$$

Pauliho vylučovací princip

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n, \dots, \mathbf{r}_{4 \times 10^6}) = -\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{r}_m, \dots, \mathbf{r}_{4 \times 10^6})$$

$$\hat{T}\Psi = -\frac{\hbar}{2m} \sum_{j=1}^{4 \times 10^6} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} \right) \Psi$$

$$\hat{V}\Psi = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{4 \times 10^6} \sum_{j=i+1}^{4 \times 10^6} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \Psi + \sum_{i=1}^{4 \times 10^6} V_{nucl}(\mathbf{r}_i) \Psi$$

Teorie funkciónálu hustoty

Schrödingerovu rovnici pro 4×10^6 elektronů můžu formálně převést na Schrödingerovu rovnici pro jediný elektron.

Všechny mnohočásticové efekty (mj. včetně Pauliho vylučovacího principu) zahrnu do dodatečného členu v potenciálu $V_{\text{exc}}(\mathbf{r})$:

$$\hat{T}\Psi + \hat{V}\Psi = E\Psi$$

$$\Psi = \Psi(\mathbf{r})$$

$$\hat{T}\Psi = -\frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi$$

$$\hat{V}\Psi = V_{\text{nuc}}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) + V_{\text{exc}}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$$

Výměnně-korelační potenciál $V_{exc}(\mathbf{r})$

Lze dokázat, že **výměnně-korelační potenciál $V_{exc}(\mathbf{r})$** existuje.

Nikdo neví, jak přesně vypadá.

A patrně nikdy vědět nebude.

Ale dá se poměrně slušně aproximovat.

Řešení byt' i jednočásticové Schrödingerovy rovnice je *skoro* nad naše síly (a nad síly našich počítačů).

Ale **vidíme na konec tunelu.**



“Vždycky v úterý odpoledne tady jdou dva cizí kluci a nesou desku s tou báječnou hrou Fan-Tanem. Nikdo tu neví, jak vypadá a jak se hraje. . .”

Kvantová chemie a fyzika pevných látek

Příklad zbytečné třídní nenávisti.

Terminologický spor: **co to znamená ab-initio.**

Bud' toho dělám málo pořádně (kvantová chemie),
nebo hodně "jen tak" (fyzika pevných látek).

Přesnost výpočtů

	mřížková konstanta [Å]	modul pružnosti [Mbar]	
Al	4.01	0.82	teorie
	4.03	0.79	experiment
Pd	3.85	2.35	
	3.88	1.95	
Ag	4.00	1.49	
	4.07	1.09	
Si	5.63	0.95	
	5.43	0.99	
Ge	5.63	0.76	
	5.65	0.76	

Osnova

Jak modelovat materiály: mnoho škál - fyzikova smrt?

Jak si poradit s 10^{23} elektrony

K čemu to (už teď) dobré jest

Předpovědi struktury pevných látek

Pevná látka (=krystal) zaujme takové uspořádání atomů, které povede k nejnižší celkové energii.^(*)

Komplikovanými postupy se probíráme jednou strukturou za druhou a ta, která nám dá **nejnižší energii**, je ta pravá.

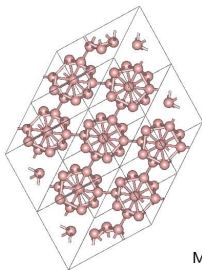
Genetický algoritmus.

Evoluční algoritmus.

...

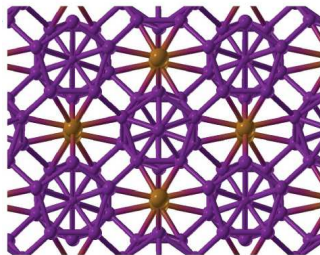
Různé formy bóru

Supertvrdá forma bóru γ -B₂₈ přepověřena nejprve teoreticky, teprve poté připravena experimentálně.



Materialschemist
wikimedia.org

Obvyklá forma krystalického bóru (α -bór, ortorombická mřížka).



nature.com

Dvě podmřížky: dvanáctiatomové klecemi & dvouatomové činky.

Iontové vazby mezi oběma podmřížkami, ačkoliv látka sestává jen z atomů jediného typu.

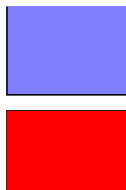
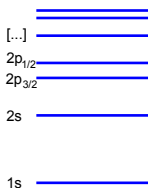
Spintronika

“Buzz-word”

Hodí se nejen pro novináře a lovce senzací.

Energetické hladiny a pásy

Kvantová fyzika vede k tomu, že ne všechny hodnoty energie jsou přípustné.



Elektron v atomu smí mít **jen některé** pevně dané **hodnoty** energie.

Energetické hladiny.

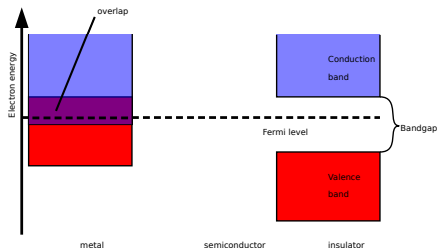
Elektron v pevné látce smí mít energii **jen v určité oblasti**.

Energetické pásy.

Některé energetické hladiny/pásy jsou **obsazené**, tam už elektron je a proto tam žádný další už nesmí (Pauliho vylučovací princip).

Jiné energetické hladiny/pásy jsou **neobsazené**, do nich elektron může-

Kovy a izolanty



Kovy: Oblasti (“pásy”) povolených hodnot **se překrývají**.
K přesunu elektronu z jedné energetické oblasti do druhé stačí i jen velmi malý impuls.
Elektrony se **mohou** krystalem **volně pohybovat**.

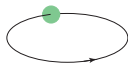
Izolanty: Oblasti (“pásy”) povolených hodnot **se nepřekrývají**.
Přesun elektronu z jedné energetické oblasti do druhé není možný (byl by k tomu potřebný příliš velký impuls).
Elektrony se **nemohou volně pohybovat** krystalem.

Elektrony mají spin

Odkud se bere **magnetismus**:

Pohybující se elektrický náboj vytváří magnetické pole.

Elektron **obíhá** kolem atomového jádra (nebo se volně prohání v kovech).



Elektron **se otáčí** kolem své osy jako vlček. (*)

Otáčení, rotace, "spinování".



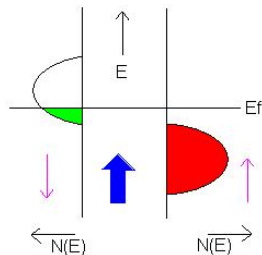
Dominantní příspěvek k magnetismu pochází od spinu.

Polokovy

Kovy (vodiče) pro elektrony se **spinem orientovaným jedním směrem.**

Izolanty pro elektrony se **spinem orientovaným druhým směrem.**

Elektrony, které zprostředkovávají elektrický proud (elektrony na “Fermiho hladině”), mají všechny stejnou orientaci spinu.



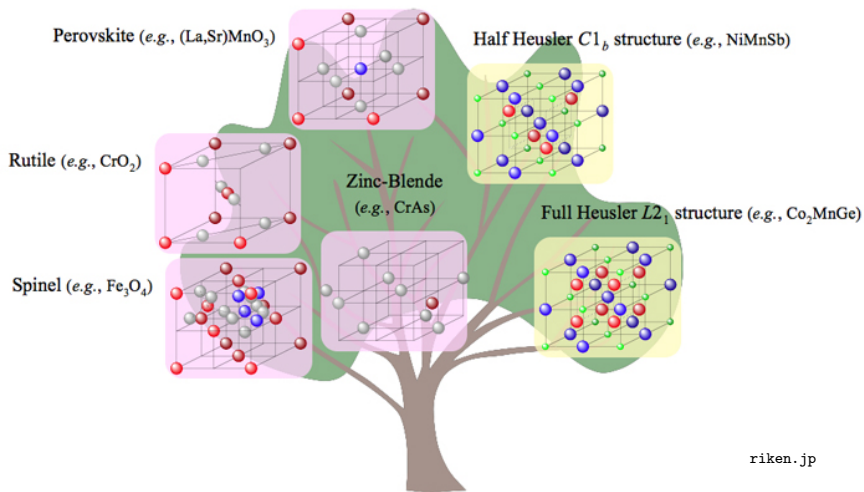
Abdul Sattar UET Lahore

wikimedia.org

NiMnSb je polokov: nejprve předpovězeno teoreticky, teprve potom potvrzeno experimentálně.

Významné pro využití v elektronice — už dnes například ve čtecích hlavách u pevných disků v počítačích.

Zoologie polokovů



Dnes známo na tisíc materiálů s různým stupněm “polokovovosti”.
Výpočty podněcují a inspirují směry výzkumu (protože navzdory své náročnosti jsou pořád mnohem rychlejší a levnější než experimenty).

Co říci závěrem?

(Šiprův) paradox křížové (ne)důvěryhodnosti:

- ▶ Teoretik nevěří výpočtům.
 - ▶ Protože moc dobře ví, jak se ty výpočty dělaly.
 - ▶ Věří však experimentům.
- ▶ Experimentátor nevěří výpočtům.
 - ▶ Protože moc dobře ví, jak se ty experimenty dělaly.
 - ▶ Věří však výpočtům.

Cesta kupředu vede ve spolupráci, protože jen tak lze dosáhnout toho, aby výzkumný tým věřil vlastním výsledkům.

Co říci závěrem?

(Šiprův) paradox křížové (ne)důvěryhodnosti:



- ▶ Teoretik nevěří výpočtům.
 - ▶ Protože moc dobře ví, jak se ty výpočty dělaly.
 - ▶ Věří však experimentům.
- ▶ Experimentátor nevěří výpočtům.
 - ▶ Protože moc dobře ví, jak se ty experimenty dělaly.
 - ▶ Věří však výpočtům.

Cesta kupředu vede ve spolupráci, protože jen tak lze dosáhnout toho, aby výzkumný tým věřil vlastním výsledkům.