

Ciepło i Geometria: poszukiwanie źródeł fononowego ciepłego efektu Halla w fazach geometrycznych

Głównym celem projektu jest dostarczenie dowodów eksperymentalnych na występowanie fononowego ciepłego efektu Halla (PTHE) w niemagnetycznych izolatorach, a następnie zidentyfikowanie mikroskopijnych mechanizmów odpowiedzialnych za to zjawisko. Ciepły efekt Halla (THE), znany historycznie jako efekt Righi-Leduca, przejawia się w obecności pola magnetycznego występowaniem poprzecznego gradientu temperatury w odpowiedzi na podłużny strumień ciepła. Chociaż początkowo zakładano, że przyczyną zjawiska może być wyłącznie siła Lorentza działająca na nośniki ładunku przenoszące ciepło, poprzeczny gradient temperatury wykryto niedawno również w materiałach posiadających jedynie obojętne kwazicząstki. Pierwsze tego typu odkrycia były tłumaczone interakcją między spinami, a siecią krystaliczną, bądź hybrydyzacją magnonowo-fononową. Jednakże pojawiające się doniesienia o dużym THE w prostych niemagnetycznych kryształach jednopierwiastkowych pokazały, że dotychczasowe wyjaśnienie jest niekompletne. Istniejące modele teoretyczne bazujące na mechanizmach rozpraszania lub standardowych obliczeniach krzywizny Berry'ego w przybliżeniu harmonicznym, nie są w stanie poprawnie przewidzieć wielkości obserwowanego PTHE w czystych materiałach. Sugeruje to, że w obecnie stosowanym opisie dynamiki fononów w obecności pola magnetycznego brakuje kluczowego elementu.

Wiodącą ideą leżącą u podstaw niniejszego wniosku jest postulat, że PTHE w izolatorach niemagnetycznych jest manifestacją faz geometrycznych nabywanych przez fonony. Zakładamy przy tym, że fizyczne pochodzenie tej fazy geometrycznej może być różne dla różnych klas materiałów. Nasza robocza hipoteza zakłada, że w izolatorach jonowych dominujący udział wynika z bezpośredniego działania sił Lorentza na efektywne ładunki Borna. Natomiast w izolatorach kowalencyjnych, gdzie takie ładunki nie występują, PTHE wywodzi się z sieciowego efektu Aharonova-Bohma. Mechanizm ten opiera się na załamaniu przybliżenia adiabaticznego Borna-Oppenheimera, umożliwiając zewnętrznemu polu magnetycznemu oddziaływanie z drganiami sieci krystalicznej za pośrednictwem chmury elektronowej. Jeśli położenie środka masy elektronów nie jest identyczne z odpowiadającym mu położeniem jonów, do funkcji falowej fononu dodawana jest dodatkowa faza Berry'ego. W rezultacie wynik procesów rozpraszania fonon-fonon staje się wrażliwy na pole magnetyczne.

Projekt wykorzystuje synergiczne podejście, łączące precyzyjne badania eksperymentalne z zaawansowanymi obliczeniami teoretycznymi *ab initio*. Prace doświadczalne obejmą szerokie spektrum modelowych materiałów izolacyjnych charakteryzujących się wysoką symetrią krystaliczną, ale różniących się charakterem wiązań i gęstością defektów. Wśród badanych materiałów będą dwuskładnikowe izolatory jonowe i kowalencyjne, a także związki z symetrią chiralną. Ze względu na śladową wielkość poprzecznego sygnału w układach niemagnetycznych, projekt obejmuje zaprojektowanie i budowę specjalistycznego stanowiska eksperymentalnego. Zestaw będzie zaprojektowany tak, aby umożliwić precyzyjną regulację kąta między gradientem temperatury a wektorem pola magnetycznego, co pozwoli na wszechstronne testowanie symetrii. W obliczeniach teoretycznych zastosowana zostanie teoria funkcjonalu gęstości (DFT) oraz metoda bezpośrednich stałych sił (ang. direct force constant approach). Do modelowania zachowania fononów w skończonych temperaturach wykorzystamy próbkowanie przestrzeni konfiguracji o wysokiej efektywności (HECSS). Kluczową innowacją będzie integracja członów nieadiabaticznych w celu obliczenia faz geometrycznych indukowanych polem. Badania będą miały na celu odtworzenie eksperymentalnych wartości ciepłej przewodności Halla poprzez uwzględnienie wyższych rzędów anharmonicznych stałych sił i analizę cech topologicznych, takich jak krzywizna Berry'ego fononów i pojawienie się fononów chiralnych.

Znaczenie naukowe projektu jest daleko idące. Ustalenie pochodzenia ciepłego efektu Halla w niemagnetycznych izolatorach będzie ważnym przyczynkiem do intensywnej debaty dotyczącej transportu ciepła w złożonych układach kwantowych. Zalicza się do nich na przykład materiały z ciecżą spinową Kitaeva lub wykazujące nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe. Być może będziemy w stanie wykazać, że obserwowane w nich zjawiska transportowe są manifestacją wszechobecnej fazy geometrycznej fononów. Pomyślnie zrealizowanie badań i ilościowe potwierdzenie hipotezy fazy geometrycznej w niemagnetycznych izolatorach w sposób fundamentalny zmieni zrozumienie fononowego transportu ciepła w obecności pola magnetycznego.