

Domieszkowanie izolatorów Motta: pasmowe elektrony, spinowe polarony czy ułamkowe wzbudzenia?

Motywacja:

Wszystkie materiały wokół nas można sklasyfikować na podstawie ich przewodnictwa elektrycznego. Te, które łatwo przewodzą prąd, nazywamy metalami (np. miedź); te, które mają bardzo wysoką oporność, to izolatory (np. diament); a te, które mogą przewodzić prąd pod pewnymi warunkami, takimi jak podgrzewanie, nazywamy półprzewodnikami (np. krzem). Co istotne, w *większości* przypadków potrafimy poprawnie przewidzieć, do której z tych trzech klas należy dany materiał. Jest to jeden z największych triumfów fizyki XX wieku. Powyższa klasyfikacja może być w dużej mierze wytłumaczona w oparciu o wiedzę zdobytą na lekcjach chemii w szkole średniej – bowiem w dużej mierze wynika ona z faktu, że elektrony w atomach tworzących kryształy zapełniają odpowiednie powłoki elektronowe, zgodnie z tzw. zasadami tworzenia konfiguracji elektronowych.

Niniejszy projekt dotyczy zrozumienia fizyki „specjalnych” materiałów, których to przewodnictwo elektryczne *nie* może być rozumiane w sposób opisany powyżej. Powodem tego jest fakt, że w niektórych kryształach, zwanych materiałami skorelowanymi, oddziaływania między elektronami, które decydują o ich właściwościach przewodzących, nie mogą być pomijane. Dzieje się tak na przykład w różnych związkach metali przejściowych (np. tlenek miedzi La_2CuO_4). Problem polega na tym, że uwzględnienie takich interakcji w przypadku rzeczywistego materiału, który składa się z liczby elektronów rzędu liczby Avogadra, jest niezwykle trudnym zadaniem, z powodu wykładniczego wzrostu złożoności problemu w zależności od liczby elektronów. Z drugiej strony, takie badania są bardzo potrzebne nie tylko z czystej ciekawości, ale także z perspektywy użytecznej – ponieważ często te skorelowane materiały posiadają spektakularne właściwości. Ten ostatni fakt ma miejsce np. w przypadku: (i) nadprzewodnictwa w stosunkowo wysokich temperaturach, odkrytego prawie 40 lat temu w domieszkowanych tlenkach miedzi, którego to pochodzenie wciąż jest niejasne; (ii) niedawno odkrytych, wyjątkowo „dostrajalnych” (i splecionych ze sobą) właściwościach magnetycznych i elektrycznych występujących w supersieciach moiré utworzonych przez „skręcone” dichalkogenki metali przejściowych.

Cel projektu:

Generalnie rzecz biorąc, projekt dotyczy pewnej klasy problemów związanych z materiałami skorelowanymi, które wydawać się mogą być częściowo zrozumiane, w ramach pewnego paradygmatu. Jednak, paradygmat ten zawiera istotne braki – a ponadto wiele rozszerzeń tego paradygmatu, które byłyby bardzo użyteczne, nie istnieje.

Bardziej konkretnie, chcemy rozważyć, co się dzieje, gdy usuwane są elektrony, tzn. tworzą się dziury (tzw. procedura domieszkowania, dobrze znana w przemyśle półprzewodnikowym), w izolatorach Motta. Te ostatnie materiały stanowią jedne z najprostszych przykładów materii skorelowanej, ponieważ w tym przypadku elektrony, których liczba jest krotnością liczby miejsc w sieci, odpychają się od siebie na tyle mocno, że nie poruszają się wcale i przewodnictwo elektryczne materiału zanika. Co istotne, domieszkowanie takich materiałów powinno umożliwić pewien ruch elektronów – podobnie jak korek drogowy, który zmniejsza się, gdy niektóre samochody opuszczają drogę. Głównym celem projektu jest pełna weryfikacja, jak również rozszerzenie istniejącego paradygmatu, który mówi nam, jak takie domieszkowane dziury poruszają się w izolatorze Motta *w zależności* od jego struktury magnetycznej.

Opis badań i oczekiwane wyniki:

Choć projekt opiera się na wcześniej zdobytej wiedzy teoretycznej i eksperymentalnej, zostaną opracowane nowe podejścia analityczne i numeryczne. Na przykład, zastosujemy niedawno zaproponowaną (i opublikowaną) metodę rozwiązania problemu jednowymiarowego domieszkowanego izolatora Motta za pomocą bardzo specyficznego języka (kwantowa baza tzw. fermionu niewolniczego) do znacznie szerszej klasy problemów. Ponieważ język używany w tej metodzie jest bardzo intuicyjny, powinien on dać nam potrzebny wgląd w niniejsze problemy i zapewnić jasne odpowiedzi dot. zarówno słuszności jak i rozszerzeń powyższego paradygmatu. Z praktycznego punktu widzenia spodziewamy się, że niektóre kluczowe właściwości nowych domieszkowanych izolatorów Motta, w szczególności ich podatność na domieszkowanie, objawiająca się nagłymi zmianami właściwości elektrycznych lub magnetycznych, będą znacznie lepiej zrozumiane, a nawet mogą być teoretycznie *przewidywane*. Ten ostatni fakt ma zasadnicze znaczenie dla wytwarzania nowych, nieznanych uprzednio materiałów, o pożądanых właściwościach.