

Właściwości jonów metali przejściowych w półprzewodnikach z szeroką przerwą i trójwymiarowych izolatorach topologicznych: Popularnonaukowe streszczenie projektu

Jony metali przejściowych (TM od *'transition metal'*) w kryształach oznaczają w tym projekcie pojedyncze atomy/domieszki, które różnią się od atomów tworzących kryształ. Właściwości takich jonów silnie zależą od otoczenia, są one inne np. w metalach, półprzewodnikach czy izolatorach.

W kryształach, elektrony najbardziej odległe od jądra atomowego tworzą wiązania chemiczne. Takie elektrony mogą być wciąż zlokalizowane blisko danego atomu, mogą być zlokalizowane wokół atomu sąsiedniego, albo też 'gdzieś pomiędzy'. Jeszcze inne elektrony, jak elektrony przewodnictwa w metalach, mogą przemieszczać się zupełnie swobodnie po całym kryształach. Dlatego też, mówimy raczej 'jon' niż 'atom' kiedy odnosimy się do ciał stałych (kryształów), mówimy też 'domieszka' kiedy mamy na myśli atom zasadniczo inny od tych tworzących kryształ.

Konsekwencją tworzenia wiązań jest to, że jony TM mogą występować w różnych stopniach utlenienia, czyli z różną liczbą elektronów wokół domieszki, i w różnych stanach spinowych. Te właściwości silnie wpływają na charakterystykę domieszkowanego kryształu. W szczególności, mogą zmieniać jego właściwości strukturalne, elektryczne i magnetyczne. Dlatego też, domieszkowanie jest jedną z najbardziej efektywnych metod zmieniania właściwości ciał stałych, i ma istotny wpływ na ewentualne zastosowania wielu przyszłościowych materiałów.

Celem projektu jest teoretyczne zbadanie właściwości jonów TM w półprzewodnikach (takich jak ZnO) i izolatorach topologicznych (Bi_2Se_3). Materiały te wykazują niezwykle fizyczne właściwości i we wszystkich z nich jony TM odgrywają szczególną rolę. Domieszkowanie ZnO zmienia jego właściwości optyczne i chcemy wiedzieć 'dlaczego?'. Bi_2Se_3 jest tak zwanym 'izolatorem topologicznym', czyli materiałem który jest izolatorem w swojej objętości, a równocześnie przewodzi prąd elektryczny na swojej powierzchni. Domieszkowanie tego związku jonami TM jest tematem intensywnych badań, gdyż może prowadzić do obserwacji kwantowego anomalnego zjawiska Halla (w którym prąd płynący na brzegach kryształu jest nieczuły na rozpraszanie) lub stanu nadprzewodnika topologicznego (w którym współistnieją pary Coopera - nośniki prądu nadprzewodzącego i fermiony Majorany - kwazicząstki, które zachowują się równocześnie jak materia i antymateria). Naszym celem jest poznanie właściwości jonów TM w tym izolatorze i wyjaśnienie podstawowych zmian zachodzących w kryształach.

Dlatego też, projekt ma istotne znaczenie w dziedzinie obliczeń z pierwszych zasad właściwości układów zawierających domieszki TM. Podjęta próba opisu jonów TM w ciałach stałych ułatwi poszukiwanie nowych kombinacji kryształu i domieszkowanego jonu o pożądanym strukturalnym, elektrycznym czy też magnetycznym właściwościach. Dlatego spodziewamy się, że nasz projekt nie tylko zainspiruje dalsze badania podstawowe w zakresie półprzewodników z szeroką przerwą i izolatorów topologicznych, ale będzie również wskazówką przydatną do produkcji nowych urządzeń opartych na materiałach zawierających domieszki metali przejściowych.