

dr Konrad Jerzy Kapcia; popularnonaukowe streszczenie projektu pt. „**Przemiany izolator-metal w układach silnie skorelowanych elektronów z oddziaływaniami dalszego zasięgu**” (SONATINA 1)

Badania przewidziane do realizacji w niniejszym projekcie dotyczą problemów związanych z odpowiedzią na pytanie: dlaczego niektóre materiały przewodzą prąd elektryczny a inne nie? W projekcie przeanalizujemy modelowe układy, w których zamieniając pewne ich parametry (które odpowiadają oddziaływaniom między elektronami) będziemy mogli przechodzić ze stanu izolatora (nieprzewodzącego prądu) do stanu metalicznego (przewodzącego). W przypadku takiej przemiany, która jest nazywana przemianą izolator-metal, istotny jest również fakt, że elektrony rozmieszczone w ciele stałym mogą wykazywać pewne szczególne uporządkowania. W niniejszym projekcie będziemy rozważać dwa typy takiego porządku. Pierwszym jest porządek ładunkowy, który związany z niejednorodnym rozkładem przestrzennym elektronów. Natomiast porządek magnetyczny (antyferromagnetyczny bądź ferromagnetyczny) jest powodowany uporządkowanym ułożeniem spinów (własnych wewnętrznych momentów magnetycznych) elektronów. Przeanalizujemy jaka jest fizyka przemiany izolator-metal w obecności takich właśnie typów uporządkowań elektronowych. W tym celu rozwiążemy modelowe układy silnie oddziałujących elektronów na sieci głównie za pomocą przybliżenia dynamicznego pola średniego (zaawansowana metoda obliczeniowa dla układów złożonych z wielu oddziałujących ze sobą elektronów) dla dowolnych koncentracji elektronowych.

Zaproponowana tematyka badawcza projektu jest tematyką teoretyczną. Planowane badania mają charakter podstawowy. Otrzymane wyniki mogą mieć istotne znaczenie dla zrozumienia wzajemnych relacji pomiędzy konkurencyjnymi oddziaływaniami w ciele stałym, szczególnie w sąsiedztwie przemiany izolator-metal. Wyniki te mogą też posłużyć do wytypowania materiałów wąskopasmowych (lub ich pewnych grup), w których korelacje elektronowe odgrywają bardzo istotną rolę (m. in. z grupy tlenków metali przejściowych, np. manganitów czy ortoferrytów), do potencjalnych zastosowań w technice jako szybkich przełączników lub w pamięciach (dyskach) o wysokich gęstościach zapisu.