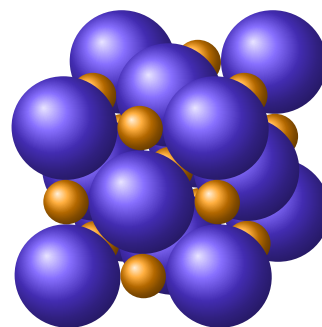


Populärvetenskaplig sammanfattning

En av de absolut största utmaningarna inom modern fysik är att beskriva beteendet hos system som består av många partiklar eller föremål som alla interagerar med varandra, så kallade interagerande mångkroppssystem. Solsystemet är ett sådant system, där solen, planeterna och alla månar interagerar med varandra genom tyngdkraften.

En annan typ av mångkroppssystem är kristaller. En kristall består av en eller flera sorters atomer som bildar ett regelbundet mönster. I en kristall interagerar alla elektroner och atomkärnor med varandra, och det är således tydligt att kristaller är väldigt komplexa system. Många fasta material är kristaller - till exempel diamant, is och de flesta moderna elektronikkomponenter - och därför är det viktigt att förstå olika kristallers egenskaper. Figur 1 visar en liten del av en tredimensionell kristall som består av två olika sorters atomer.



Figur 1: Del av tredimensionell kristall som består av två olika typer av atomer.

Att beskriva ett mångkroppssystem exakt blir omöjligt redan för något tiotal partiklar, eftersom inte ens moderna superdatorer har tillräckligt med minne och processorkraft för att hantera så komplexa problem. För att kunna förstå hur en kristall fungerar måste man därför förenkla problemet på flera olika sätt. Mycket forskning handlar därför om att lista ut hur olika olösliga problem kan förenklas så att de kan lösas, men trots förenklingarna ge information om det riktiga systemet.

I det här projektet har vi studerat en kristall med hjälp av två huvudsakliga förenklingar. Första förenklingen är att elektronerna bara interagerar med andra elektroner som rör sig kring samma atomkärna, samt med den atomkärna de rör sig kring. De olika atomkärnorna interagerar inte alls med varandra. En sådan förenkling kallas modell, eftersom den beskriver huvuddragen och vissa detaljer hos en riktig kristall, men saknar andra detaljer. Det innebär att olika modeller är lämpliga för att beskriva olika kristaller. Den andra förenklingen behövs för att lösa kristallmodellen. Trots att modellen är enkel relativt en riktig kristall så är även den olöslig för de flesta system. Därför använder man olika metoder för att göra en ungefärlig lösning av modellen. En sådan lösning stämmer t. ex. bara för vissa typer av modeller, eller om partiklarna bara interagerar litegrand.

Metoden vi har undersökt kallas täthetsfunktionalteori (DFT). I den här metoden så löser man inte det interagerande mångkroppssystemet utan ett hjälpsystem där partiklarna inte interagerar, eftersom det är mycket lättare att lösa. Partiklarna i de båda systemet måste dock bete sig likadant, vilket kan åstadkommas genom att placera hjälpsystemet i en miljö som ger upphov till rätt beteende. Problemet med DFT är att man måste veta hur den här miljön ser ut. Miljön kan konstrueras genom att lösa systemet med en mer avancerad metod som inte behöver ett icke-interagerande hjälpsystem, men som tar väldigt mycket längre tid. Väl miljön är känd kan man använda DFT för att studera mer komplicerade system, och det skulle dessutom ta mindre tid. Det finns alltså mycket att vinna på att ta fram den här miljön för olika typer av modeller, och DFT används och har använts mycket inom kemin för att undersöka olika molekyler. En av grundarna av metoden tog till och med emot Nobelpriset 1998 för sitt arbete, så det råder ingen tvekan om hur användbar DFT-metoden är.