

## ESTRUCTURA ELECTRÓNICA Y MAGNETISMO EN SISTEMAS FUERTEMENTE CORRELACIONADOS

**Código:** ING341

**Tipo de Investigación:** Básica

**Carreras que se vinculan:** Lic. Física, Dr. Física

**Período:** 2011 - 2014

**Director:** Manuel, Luis Oscar

**E-mail:** manuel@ifir-conicet.gov.ar

**Integrantes:** Trumper, Adolfo E; Hamad, Ignacio J; Mezio, Alejandro; Sposetti, Cintia N

### Objetivos

Los objetivos particulares son:

1) Excitaciones no convencionales en el antiferromagneto triangular: Cálculos recientes de expansiones en series sobre el modelo de Heisenberg en la red triangular predicen un factor de estructura dinámico cuyo espectro de excitaciones presenta desviaciones importantes, a altas energías, respecto de los predichos por la teoría de ondas de espín [Zheng06]. Se conjeturó, además, que la aparición de mínimos en el espectro de tipo rotónico podría estar relacionado con la presencia de excitaciones de pares de espinones de espín  $1/2$ . Motivados por estos resultados, analizaremos si efectivamente una teoría con grados de libertad espinónicos, como la teoría de bosones de Schwinger, puede conducir a la existencia de dichas excitaciones rotónicas en un antiferromagneto sobre la red triangular.

2) Dinámica de hueco y fraccionalización en el modelo de Heisenberg J1-J3: Nos proponemos investigar la dinámica de un hueco cerca de la región crítica cuántica del modelo de Heisenberg J1-J3. El objetivo es dilucidar si la reducción de peso de cuasipartícula en esta región se debe a un deconfinamiento de excitaciones elementales exóticas de espín  $1/2$  [Poilblanc06] o a un escenario convencional de hueco acoplado a magnones de espín 1.

3) Aisladores de Mott frustrados dopados: Estudiaremos el aislador de Mott triangular a dopaje finito, analizando la robustez del orden magnético [Weber06], la existencia de fases de Nagaoka [Haerter05] y las características de la fase metálica. Se pretende aplicar los resultados al análisis del comportamiento del estado normal de los cobaltatos  $\text{NaxCoO}_2$  [Ong04]. Realizaremos un estudio análogo para el modelo t-J sobre la red cuadrada, con interacciones a más vecinos. Estos estudios son de interés en relación a las propiedades magnéticas de los nuevos superconductores ferropnictidos, ya que algunos autores [Si08] sostienen que los efectos de correlación fuerte pueden ser importantes en estos compuestos.

4) Transición de Mott sobre la red triangular: Investigaremos el efecto de frustración magnética sobre la transición de Mott, analizando las propiedades del modelo de Hubbard sobre la red triangular [Galanakis09]. Estudiaremos en particular la transición desde la fase de  $120$  grados a la fase metálica. Consideraremos además el caso de una red triangular anisotrópica, relevante para los compuestos orgánicos  $\text{k}(\text{BEDT-TTF})_2\text{X}$  [Shimizu03].

5) Cálculos realistas para materiales correlacionados: Implementaremos un esquema de cálculo que combine LDA y DMFT [Kotliar06], utilizando la aproximación diagramática OCA [Haule10] y diagonalización exacta [Perroni07] para resolver la impureza de Anderson. Este tipo de esquemas es el estado del arte para la determinación de la estructura electrónica de materiales fuertemente correlacionados. Nuestro interés particular es el estudio de compuestos de fermiones pesados, en los cuales se da una competencia entre la física de Kondo y fluctuaciones magnéticas no locales.

### Resumen Técnico

Los sistemas electrónicos fuertemente correlacionados tienen propiedades inusuales, tales como superconductividad no fonónica, transiciones de Mott y fases de líquido de espines con excitaciones fraccionarias. Estos comportamientos dependen de ingredientes tales como la dimensionalidad y geometría del cristal, frustración y degeneración orbital. Los materiales correlacionados son intensamente investigados por su interés científico básico como paradigmas de nuevos comportamientos de la materia, y también por la gran potencialidad tecnológica que tienen.

Motivados por comportamientos observados en compuestos correlacionados tales como cupratos, cobaltatos y sales orgánicas, estudiaremos varios aspectos de los aislantes de Mott, considerando especialmente los efectos de frustración y de baja dimensionalidad:

a) Analizaremos la dinámica de las fluctuaciones de spin en sistemas frustrados, representando los operadores de spin mediante bosones de Schwinger. Estos bosones describen simultáneamente magnones y excitaciones fraccionarias (espinones). El interés en la fraccionización de las excitaciones deriva de la propuesta sobre separación de spin y carga como el mecanismo subyacente en la superconductividad en los cupratos. Dentro de este esquema estudiaremos el movimiento de un hueco en un antiferromagneto cerca de un punto crítico cuántico, donde se cree que resulta esencial considerar los espinones.

b) Investigaremos cómo evolucionan las propiedades de dos aisladores de Mott frustrados - antiferromagneto triangular y  $J_1$ - $J_2$ - cuando se los dopa con huecos. Para ello usaremos el modelo t-J resuelto mediante la técnica de fermiones esclavos y desarrollos diagramáticos. En particular, pretendemos conocer la estabilidad del orden magnético, la existencia de nóveles fases de Nagaoka y las propiedades dinámicas de las fases metálicas. Además estudiaremos la transición de Mott misma sobre la red triangular, mediante la técnica de campo medio dinámico (DMFT). Indagaremos sobre la existencia de una fase aisladora genuina, paramagnética, para valores intermedios de repulsión coulombiana.

Otro de los propósitos del proyecto es continuar con el estudio realista de materiales correlacionados. Para ello trabajaremos en la implementación computacional de métodos mixtos que combinan cálculos de primeros principios, en el contexto de la teoría de la funcional densidad (DFT-LDA), con métodos de la teoría cuántica de muchos cuerpos. Implementaremos el método LDA+DMFT, que permite tratar una mayor variedad de materiales correlacionados. Para resolver el modelo efectivo de la impureza de Anderson que surge en DMFT, recurriremos a las técnicas complementarias: one-crossing approximation (OCA) y al método de diagonalización exacta. Una vez implementado este método, estudiaremos las propiedades espectrales y de transporte de compuestos de fermiones pesados que presentan el fenómeno de criticalidad cuántica.

**Disciplinas:** Física

**Especialidad:** Física del estado sólido

**Palabras Clave:** magnetismo cuántico - aisladores de Mott - frustración - física de Kondo