

Nr umowy: UMO-2017/24/C/ST3/00276

Tytuł: Przemiany izolator-metal w układach silnie skorelowanych elektronów z oddziaływaniami dalszego zasięgu

Cel projektu

Głównym celem projektu jest zbadanie i wyjaśnienie mechanizmu przemiany izolator-metal (I-M) w fazach z dalekim porządkiem elektronowym (ładunkowym i/lub magnetycznym). Analizy tej dokonamy rozwiązując modelowe układy silnie oddziałujących elektronów na sieci głównie za pomocą przybliżenia dynamicznego pola średniego (DMFT, dla fermionów) dla dowolnych koncentracji n . Wyniki te zostaną też porównane z tymi otrzymanymi innymi metodami. Badane układy będą opisywane przez rozszerzone modele Hubbarda (EHM), w których oprócz oddziaływania lokalnego U , występują oddziaływania międzywęzłowe (dalszego zasięgu) typu (i) gęstość-gęstość (głównie odpychające $W > 0$) lub (ii) magnetyczne typu Isinga (zarówno ferromagnetyczne $J > 0$, jak i antyferromagnetyczne $J < 0$). Przewidywania teoretyczne zostaną przeanalizowane w kontekście wyników eksperymentalnych dla szerokiej klasy tlenków metali przejściowych oraz związków z niejednorodną mieszaną walencyjnością, zarówno nieorganicznych jak i organicznych, a także zimnych gazów atomowych na sieciach optycznych.

Przemiana I-M była intensywnie badana w modelu Hubbarda ($W=0, J=0$) zarówno w fazach paramagnetycznych (bez dalekiego porządku) jak i pomiędzy fazami antyferromagnetycznymi (model Hubbarda z frustracją), głównie dla pasma wypełnionego w połowie ($n=1$). Szczególnie duże sukcesy na tym polu odniosło przybliżenie DMFT. EHM z oddziaływaniami W był analizowany w przybliżeniu DMFT wyłącznie w szczególnych przypadkach, bez uwzględnienia porządku magnetycznego. Nasze wstępne wyniki dla stanu podstawowego pokazują, że dla niezerowego mogą pojawić się dwie różne fazy izolatora uporządkowanego ładunkowo (COI) (z $n=1/2$ i $n=1$), a także faza metaliczna uporządkowana ładunkowo (COM). Przemiana COI-COM może być nieciągła lub ciągła, co oznacza, że w pewnych zakresach n mogą wystąpić stany z separacją COM/COI, w których obie separujące fazy są uporządkowane ładunkowo. Model EHM z niezerowym J nie był dotychczas analizowany w przybliżeniu DMFT. Spodziewamy się tutaj interesujących przemian M-I pomiędzy fazami uporządkowanymi antyferro- i/lub ferro- magnetycznie. Zachowanie układu będzie różne dla $J<0$ oraz $J>0$.

Główna hipotezę badawczą niniejszego projektu można określić następująco. W ramach przyjętych modeli do opisu układów silnie skorelowanych elektronów chcemy zbadać różne przemiany fazowe w nich występujące. Spodziewamy się występowania przemian izolator-metal pomiędzy fazami z porządkiem ładunkowym lub magnetycznym oraz występowania stanów z separacją fazowa w pewnych zakresach koncentracji. Oddziaływania międzywęzłowe mogą stabilizować fazy metaliczne z porządkiem

elektronowym i powodować przemiany izolator-metal pomiędzy fazami uporządkowanymi, które mogą być zarówno ciągłe jak i nieciągłe, w zależności od parametrów modelu, oraz stabilizować stany z separacją fazową. Nowatorska idea tego projektu jest ustalenie wpływu oddziaływań dalszego zasięgu na przemianę I-M oraz określenie typów separacji fazowych pomiędzy fazami, z których jedna jest izolatorem, a druga jest metalem.