8. "Transición metal-aislante en compuestos de varias capas de CrO2"

Dr. Armando Aligia

Tel: 5342 Email: aaligia@gmail.com Cargo: Profesor titular

Codirector:

Lugar: Grupo de teoría de la materia condensada

Orientación: Materia Condensada

Método 1: Teórico Método 2:

Información Adicional: El trabajo permite introducir al estufiante en cálculos de estructura electrónica de sistemas altamente correlacionados, los cuales son de utilidad para muchos sistemas actualmente, como superconductores no convencionales, materiales magnéticos, ferroelécteicos.

Descripción:

Nos interesa la serie de compuestos de Cr de fórmula general Sr n+1 Cr n O 3n+1, en donde se observa orden de espín y orbital. En particular, para el compuesto con n=2, el director propuesto ha derivado un Hamiltoniano efectivo del tipo Heisenberg, pero que contiene además del espín usual, un pseudoespín que describe los grados de libertad orbitales. Ver referencia abajo. Esto ha sido parte de una colaboración con grupos experimentales y teóricos de Grenoble, Francia y de Argentina del Centro Atómico Constituyentes y Bariloche, la cual ha permitido una explicación consistente del experimento. Este compuesto es de dos capas de CrO2. La teoría y el experimento son consistentes con que el compuesto es aislante, con un ordenamiento simultáneo de los grados de libertad y espín con un cambio total de entropía de Rln6 debido a los tres grados de libertad del espín S=1 y dos grados de libertad orbitales. Los resultados sugieren además que el orden orbital corresponde a una dimerización entre planos.

Actualmente en Grenoble están estudiando experimentalmente el compuesto con n=3 que tiene tres capas CrO2. Lo llamativo es que este compuesto es metálico, porque se observa una contribución lineal con temperatura finita del calor específico. La resistividad no es muy confiable debido a defectos en el material y lo mismo sucede el de una capa, n=1, o el límite de n infinito de la serie: SrCrO3. Esto inmediatamente conduce a la pregunta, ¿De qué depende el carácter metálico o aislante? ¿Hay efectos de frustración para n impar que favorecen el estado metálico?

Para resolver estas preguntas es necesario primero plantear un hamiltoniano efectivo que tenga en cuenta no sólo los grados de libertad de espín y orbitales, sino también los grados de libertad de la carga, y resolver éste con métodos que tengan en cuenta explícitamente la correlaciones electrónicas. Entre éstos, los más simples son los del tipo bosones esclavos en campo medio y los más sofisticados son los del campo medio dinámico, DMFT, combinado con la teoría de funcional densidad en la aproximación de densidad local, LDA. Dependiendo de las aptitudes e interese del estudiante, se puede comenzar con los métodos analíticos más simples, o encarar los numéricos, en este caso en colaboración con otros investigadores del grupo, la dra Hallberg y posiblemente de Buenos Aires.

Referencia: J. Jeanneau, ... A. A. Aligia, and M. Núñez-Regueiro, Phys. Rev. Lett. 118, 207207, 2017.