

Ekranowanie i oscylacje Friedel'a w niejednorodnych układach z skorelowanymi fermionami

5 Grudzień, 2016

Streszczenie

Rozprawa doktorska zawiera analizę teoretyczną oraz obliczenia numeryczne dotyczące ekranowania elektronowego oraz oscylacji Friedel'a (FO) w silnie skorelowanych układach fermionowych w obecności niejednorodnego potencjału zewnętrznego. Przestrzenne oscylacje gęstości elektronowej pojawiają się w sąsiedztwie domieszki na skutek kwantowego rozpraszania na domieszce. Oscylacje te obserwuje się w niskich temperaturach w układach metalicznych. Układ oddziałujący modelowany jest w rozprawie za pomocą hamiltonianu Hubbarda, który został rozwiązany numerycznie w przybliżeniu dynamicznej teorii pola średniego w zastosowaniu do układu niejednorodnego przestrzennie (R-DMFT). Rozważane są jedno, dwu i trójwymiarowe układy sieciowe z okresowymi warunkami brzegowymi. Zewnętrzny potencjał niejednorodny modelowany jest za pomocą pojedynczej domieszki, dwóch domieszek lub niejednorodności obejmującej większą liczbę węzłów sieci. W rozprawie rozważane są różne modele uwzględniające oddziaływania elektronowe. Badano efekty tych oddziaływań na oscylacje Friedla, w szczególności blisko przejścia Motta metal-izolator. Wyniki obliczeń numerycznych zaprezentowanych w rozprawie pokazują, że oscylacje Friedla są tłumione przez oddziaływania elektronowe, zanikają wokół przejścia Motta i są całkowicie wygaszone w fazie izolatora. Wzrost temperatury układu powoduje tłumienie oscylacji. Okres i faza oscylacji nie zależą od wielkości oddziaływań, gdy gęstość cząstek odpowiada sytuacji w której pasmo jest w połowie zapełnione. W rozprawie badano również spełnienie reguły sum Friedla w przypadku układów oddziałujących. Ponadto badano zmianę ładunku ekranującego wokół domieszki określaną jako ładunek ekranowania wokół domieszki (ang. "Neighbour screening charge" lub "N-screening charge") w zależności od oddziaływania, temperatury i dla różnych wartości potencjałów na domieszce. Badania w rozprawie pokazują, że oddziaływania osłabiają efekty ekranowania. Przedstawiono funkcje spektralne w obecności zewnętrznej niejednorodności i oddziaływań elektronowych na różnych węzłach sieci. W obecności dwóch domieszek oddziaływania osłabiają wpływ efektów interferencyjnych domieszek na oscylacje. Formalizm rozpraszania jednociałowego zmodyfikowano w celu opisu efektów korelacji w wielociałowych układach poprzez wprowadzenie energii własnej niezależnej od pędu odpowiadającej eliptycznej gęstości stanów. Rezultaty obliczeń uwidaczniają wpływ korelacji elektronowych na przesunięcie fazowe i funkcję spektralną. Rozprawa zawiera rezultaty numeryczne, które mogą stanowić motywację do przyszłych badań eksperymentalnych.