

Índice de contenidos

Índice de contenidos	v
Índice de símbolos	vii
Resumen	ix
Abstract	xi
1 Introducción	1
1.1 Sistemas de electrones interactuantes.	2
1.1.1 Nociones generales	2
1.2 Campo medio dinámico.	8
1.2.1 De la red a la impureza: ecuaciones de DMFT.	9
1.2.2 Bosones Esclavos Invariantes ante Rotaciones para resolver el problema de la impureza cuántica.	14
1.2.3 Invariancia ante transformaciones unitarias	16
1.3 Estructura electrónica de materiales a partir de cálculos <i>ab initio</i> . . .	25
1.3.1 Teoría de Funcional Densidad	25
1.3.2 DFT+DMFT	32
1.3.3 DFT+DMFT usando RISB para resolver el problema de impureza.	35
2 Propiedades estructurales y magnéticas de los compuestos GdMIn₅	43
2.1 Introducción	43
2.2 Espectro de fonones	45
2.3 Constantes de intercambio entre iones Gd ³⁺	50
2.3.1 Un modelo para la constante de acoplamiento entre planos	53
2.4 Comparación con experimentos	55
2.5 Efectos de una distorsión ortorrómbica en las constantes de intercambio.	57
2.6 Conclusión: Mayor bidimensionalidad en los compuestos basados en Co.	58
3 Transición metal-aislante de Mott en sistemas multiorbitales	61
3.1 Efecto de las interacciones interorbitales en la transición metal-aislante.	62

3.1.1	Hamiltoniano densidad-densidad	64
3.1.2	Hamiltoniano de Kanamori	74
3.2	Transición de Mott orbitalmente selectiva en presencia de un campo cristalino	78
3.2.1	Sistema semilleno ($n = 3$)	79
3.2.2	Sistema dopado	80
3.3	Conclusiones	84
4	Propiedades electrónicas de Sr_2RuO_4	87
4.1	Introducción	88
4.2	Estructura electrónica de Sr_2RuO_4	92
4.2.1	Densidad de estados y superficie de Fermi	92
4.2.2	Correlaciones electrónicas más allá de LDA	93
4.3	Presión biaxial	101
4.4	Presión uniaxial	107
4.5	Conclusiones	110
5	Conclusiones y perspectivas	113
A	Cálculo de fonones a partir de Teoría de Funcional Densidad.	119
A.0.1	Fonones desde primeros principios	119
B	Uso de simetrías del Hamiltoniano local.	123
B.0.2	Estados <i>simétricos</i>	123
B.0.3	Operadores <i>simétricos</i>	126
C	Cómputos con funciones de Green en la representación de Matsubara	127
C.1	Sumas de Matsubara.	127
C.1.1	Álgebra de los coeficientes de la expansión de alta frecuencia.	128
C.2	Constructores	130
D	Información adicional para el Capítulo 4	133
D.1	Armónicos cúbicos y armónicos cúbicos complejos	133
D.2	Multipletes atómicos en presencia de la interacción espín-órbita	134
D.3	Superficie de Fermi	135
	Bibliografía	137
	Publicaciones	153
	Agradecimientos	155