

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2016/22



## ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

## A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

## 1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

<b>Šifra projekta</b>	Z1-5442
<b>Naslov projekta</b>	Študija sistemov z močno interagirajočimi elektroni preko obravnave modela za organske superprevodnike
<b>Vodja projekta</b>	26458 Jure Kokalj
<b>Tip projekta</b>	Zt Podoktorski projekt - temeljni
<b>Obseg raziskovalnih ur</b>	3400
<b>Cenovni razred</b>	B
<b>Trajanje projekta</b>	08.2013 - 07.2015
<b>Nosilna raziskovalna organizacija</b>	106 Institut "Jožef Stefan"
<b>Raziskovalne organizacije - soizvajalke</b>	
<b>Raziskovalno področje po šifrantu ARRS</b>	1 NARAVOSLOVJE 1.02 Fizika 1.02.02 Teoretična fizika
<b>Družbeno-ekonomski cilj</b>	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)
<b>Raziskovalno področje po šifrantu FOS</b>	1 Naravoslovne vede 1.03 Fizika

## B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

2. Povzetek raziskovalnega projekta<sup>1</sup>

SLO

Projekt je namenjen boljšemu razumevanju sistemov z močno interagirajočimi elektroni, med katere spadajo tudi kuprati in organski superprevodniki kot najbolj poznani predstavniki. Razumevanje teh sistemov je oteženo zaradi kvantne več-delčne narave, rezultirajočih (*emergentnih*) pojavov, močnih korelacij in tekmujočih faz. V okviru projekta

smo naredili ekstenzivno numerično študijo Hubbardovega modela na anizotropni trikotni mreži. Ta model je bil predlagan kot minimalen model za opis organskih superprevodnikov in v limiti močne anizotropije ustreza kvadratni mreži, ki je primerna za opis kupratov.

Kot glavno numerično metodo smo uporabili Lanczosevo metodo za končne temperature, ki omogoča obravnavo končnih temperatur, prostorskih korelacij in odvisnosti od valovnega vektorja. To ni mogoče z nekaterimi drugimi metodami, ki so npr. omejene na temperaturo nič (npr. variacijski Monte Carlo) ali na lokalne korelacije (npr. dinamična teorija povprečnega polja).

V projektu smo se osredotočili na obnašanje pri Mottovem prehodu kovina-izolator ali ob njem, kjer se pojavijo zanimive faze in pojavi, vključno s fazo slabe kovine, upornostjo linearno v temperaturi, nekonvencionalno superprevodnostjo, fazo pseudo-energijske vrzeli ter neprevodnimi fazami z različnimi stopnjami spinske frustracije.

Preko izračuna večih fizikalnih količin (npr. kemijskega potenciala, entropije, specifične toplote, spinske susceptibilnosti, prevodnosti, dinamične spinske susceptibilnosti) smo dobili celostno sliko faznega diagrama in lastnosti posameznih faz v Hubbardovem modelu na anizotropni trikotni mreži. Nadaljnja uspešna kvantitativna primerjava izračunanih količin in eksperimentalnih podatkov za organske superprevodnike daje močno podporo uporabljenemu modelu za opis teh materialov. Po drugi strani pa smo ugotovili, da je za opis določenih količin potrebna nadgradnja modela.

Med drugimi smo pokazali, da je fazo slabe kovine mogoče razumeti preko velikih in fluktuirajočih magnetnih momentov. Poudarili smo režim parametrov modela za možno fazo spinske tekočine in pseudo-energijske vrzeli. Potrdili smo, da je vzrok za pseudo-energijsko vrzel v spinskih korelacijah. Določili smo, da je mehanizem za Mottov prehod vezava praznega (*holona*) in dvojno zasedenega mesta (*doublona*). Izračunali smo elektronski prispevek k termični razteznosti in pokazali, da je termoelektričnost povečana pri prehodu iz Fermijeve tekočine v slabo kovino zaradi povečanja entropije. Pokazali smo, da je v režimu slabe kovine prevodnost določena predvsem z nabojno susceptibilnostjo in da jo je preko nje mogoče tudi razumeti. Pokazali smo tudi, da spinske korelacije povečajo nabojno susceptibilnost, kar zmanjša upornost v režimu pseudo-energijske vrzeli pri dopiranih Mottovih izolatorjih. Pokazali smo tudi, kako nered ali spinska frustracija zmanjšata temperaturo prehoda v šibko sklopljenih spinskih verigah ali ravninah.

ANG

This project is devoted to better understanding of strongly interacting electron systems which include cuprate high-temperature superconductors and organic superconductors as a prominent examples. These systems are difficult to understand due to quantum many body nature, emergent phenomena, strong correlations and competing phases. In this project we performed an extensive numerical study of the Hubbard model on the anisotropic triangular lattice. This model was proposed as a minimal model for the description of organic superconductors, and in a limit of extreme anisotropy corresponds to a square lattice, which is applicable to cuprates.

The main numerical method used is the Finite temperature Lanczos method, which allows for finite temperature calculations, study of spatial correlations and wave vector dependent quantities. This is not the case for some other methods, which for example are limited to temperature zero (e.g. variational Monte Carlo) or to local correlations (e.g. dynamical mean field theory).

The focus of the project was the behaviour at, or close to, the Mott metal-insulator transition, where interesting phases and phenomena occurs, including bad-metallic regime, intriguing linear-in-temperature resistivity, unconventional superconductivity, pseudogap phase and various insulating phases with different extend of spin frustration.

By calculating several physical quantities (e.g. chemical potential, entropy, specific heat, spin susceptibility, double occupancy, thermal expansion coefficient, thermopower, conductivity, dynamical spin susceptibility) we obtained overall picture of the phase diagram and

properties of individual phases of the Hubbard model on the anisotropic triangular lattice. Further successful quantitative comparison of the calculated quantities with the experimental data for the organic superconductors gives strong support for the description of these materials with the used model. On the other hand, we stressed that for the description of some quantities, certain improvements of the model are needed.

We showed that the bad-metallic phase could be understood via large fluctuating local moments. We pointed out the regime of model parameters for possible spin liquid and pseudogap phase. We argued that the pseudogap originates in spin correlations and determined that holon-doublon binding is the mechanism for the Mott transition. We calculated electronic contribution to the thermal expansion and showed that thermoelectricity is enhanced at the Fermi liquid – bad-metal crossover due to enhanced entropy. We showed that in the bad-metallic regime the conductivity is dominated and explained by charge susceptibility and argued that spin correlations enhance charge susceptibility, leading to decreased resistivity in pseudogap regime in doped Mott insulators. We also showed how disorder or spin frustration reduces the transition temperature in weakly coupled spin chains or plains.

### 3. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem projektu<sup>2</sup>

Glavni namen tega projekta je bil raziskati, bolje razumeti in popisati sisteme z močnimi elektronskimi interakcijami, ki privedejo do zanimivih in kompleksnih pojavov, med katerimi so npr. tudi visoko-temperaturna superprevodnost, Mottov prehod izolator-kovina, razne spinske ureditve ali pojav spinske tekočine ter pojav tako imenovane slabe kovine. V ta namen smo obravnavali Hubbardov model na anizotropni trikotni mreži, ki je prototipičen mikroskopski model za opis močno interagirajočih elektronov, ni pa ga mogoče točno rešiti. Za obravnavo smo uporabili numerično metodo, imenovano *Lanczoseva metoda za končne temperature*, saj je v režimu močnih interakcij numerični pristop najbolj zanesljiv. Poleg tega pa metoda omogoča obravnavo tako končne temperature kot tudi prostorskih korelacij, kar ni mogoče obravnavati z nekaterimi drugimi metodami, kot sta npr. variacijski Monte Carlo in teorija dinamičnega povprečnega polja. Za izračun določenih lastnosti in boljše kvalitativno razumevanje smo uporabili tudi analitične izračune, približke povprečnega polja ter renormalizacijsko grupo gostotne matrike. Obravnavani model je zanimiv tako iz teoretičnega vidika, saj omogoča obravnavo in boljše razumevanje močno koreliranih sistemov, kot tudi iz eksperimentalnega vidika. Predlagano je bilo namreč, da bi bil ravno ta model lahko minimalen model za opis organskih superprevodnikov, po drugi strani pa model v limiti močne anizotropije odgovarja Hubbardovemu modelu na kvadratni mreži, ki se uporablja za opis visokotemperaturnih superprevodnikov (kupratov).

#### **Fazni diagram Hubbardovega modela na anizotropni trikotni mreži ter minimalni model za organske superprevodnike**

Pomembnejši vprašanji, s katerima smo se ukvarjali v tem projektu, sta "Kakšen je fazni diagram Hubbardovega modela na anizotropni trikotni mreži?" in "Kako dobro ta model opiše organske superprevodnike?". V ta namen smo najprej izračunali nabojno susceptibilnost ter preko nje določili režime kovinske faze in Mottovega izolatorja, oziroma kritično jakost interakcije v odvisnosti od stopnje anizotropije, pri kateri pride do Mottovega prehoda kovina-izolator. Pokazali smo, da se kritična jakost interakcije sklada z vrednostmi, dobljenimi z variacijskim Monte Carlom ter renormalizacijsko grupo integrala poti, medtem ko znatno odstopa od ocene preko 'slave rotor' pristopa, teorije resonančne valenčne vezi, teorije dinamičnega povprečnega polja ter Brinkman-Rice približka. S tem naši rezultati odražajo točnost ali netočnost nekaterih alternativnih pristopov. Jakost interakcije, pri kateri se zgodi Mottov prehod, se ujema z oceno jakosti interakcije, dobljene s teorijo gostotnega funkcionala za eksperimentalno izmerjene strukture organskih soli s prenosom naboja. Primerjava entropije v prevodni fazi in v Mottovem izolatorju daje podporo odsotnosti ponovljene faze v izotropnem režimu in njeno prisotnost pri večji anizotropiji, kar je v skladu s prejšnjimi rezultati in eksperimentom.

Na kovinski strani Mottovega prehoda smo preko izračuna specifične toplote, spinske susceptibilnosti in termoelektričnosti opazili prehod iz Fermijeve tekočine v tako imenovano

fazo slabe kovine. Izračunana temperatura prehoda se ujema z eksperimentalno izmerjeno, medtem ko manjše kvantitativno odstopanje med modelirano in izmerjeno spinsko susceptibilnostjo ostaja nepojasnjeno. Poudarili smo tudi, da je fazo slabe kovine mogoče razumeti kot fazo z velikimi in fluktuirajočimi magnetnimi momenti.

Preko sklopitve elektronskih prostorskih stopenj z mrežo smo z uporabo Born-Oppenheimerjevega približka izračunali elektronski prispevek  $h$  koeficientu termične razteznosti. Pokazali smo, da je zaradi korelacij močno povečana entropija, še posebej pri prehodu v slabo kovino, kar močno poveča elektronski prispevek  $h$  koeficientu termične razteznosti. Pokazali smo tudi, da je prispevek anizotropen, občutljiv na prehod v slabo kovino in da bi eksperimentalno opažene anomalije lahko imele izvor v elektronskih korelacijah. Izdelan teoretičen izračun nudi podlago za vse bodoče obravnave vpliva močnih elektronskih korelacij na termično razteznost.

Poleg tega smo izračunali termoelektrični koeficient in pokazali, da ga elektronske korelacije močno povečajo, da ima nemonotono temperaturno odvisnost in maksimum pri temperaturi dekoherence. Te lastnosti se kvantitativno dobro ujemajo z meritvami, medtem ko uporabljen model ne more popisati orientacijske odvisnosti, ki je posledica dodatne dimerizacije na mreži.

Z izračunom prevodnosti smo ugotovili, da jo je pri visoki temperaturi možno razumeti preko nabojne susceptibilnosti in da je pri primerjavi z eksperimentom potrebno pravilno mapirati eksperimentalne spremembe tlaka ter temperature na spremembe parametrov modela.

Rezultati za NMR relaksacijski čas se kvalitativno ujemajo z eksperimentom in se skladajo s teorijo, da je v slabi kovini relaksacijski čas močno povečan zaradi tvorbe lokalnih in fluktuirajočih magnetnih momentov.

Z izračunom temperaturne odvisnosti spinske susceptibilnosti ter odvisnosti dvojne zasedenosti od jakosti interakcije smo našli močne indikacije za prisotnost faze spinske tekočine, kar bistveno prispeva k nadaljnjim teoretičnim študijam te nerazumljene faze, ki pa je tudi eksperimentalno opažena v organskih superprevodnikih.

Preko študije široke palete fizikalnih količin projekt omogoča celostno sliko faznega diagrama modela ter poglobljeno teoretično razumevanje posameznih faz. Poleg tega narejena primerjava z eksperimenti daje trdno podporo opisa organskih superprevodnikov s Hubbardovim modelom na anizotropni trikotni mreži ter poudari nekatere pomanjkljivosti pomembne za opis določenih količin. Vse to znatno prispeva k boljšemu razumevanju in nadaljnjemu razvoju področja močno koreliranih elektronov, kar se kaže v objavah v mednarodno priznanih revijah, mednarodnem odzivu, poglobljenemu sodelovanju z mednarodnimi inštitucijami ter povečanemu številu vabljenih predavanj.

Večina omenjenih rezultatov je bila dobljena s tesnim sodelovanjem s prof. dr. Rossom H. McKenziejem iz *Univeristy of Queensland* (Avstralija), rezultati pa so objavljeni v revijah *Phys. Rev. Lett.* ter *Phys. Rev. B*.

### **Faza pseudo-energijske vrzeli**

V nekaterih organskih superprevodnikih so opazili fazo pseudo-energijske vrzeli in vprašanje je, ali obravnavani model lahko opiše takšno fazo. Izračuni spinske susceptibilnosti so pokazali prisotnost pseudo-energijske vrzeli pri polovični zasedenosti v modelu, kar se sklada z eksperimentom na organskih superprevodnikih. Ravno tako smo opazili prisotnost pseudo-energijske vrzeli v povečani nabojni in zmanjšani spinski susceptibilnosti v dopiranem Mottovem izolatorju, kar je relevantno za kuprate. Povečana nabojna susceptibilnost razloži tudi kontra-intuitivno zmanjšanje upornosti v pseudo-energijski fazi. Opazili smo tudi, da je pseudo-energijska vrzel v primeru dopiranega izolatorja veliko večja na mrežah brez spinske frustracije, kar daje močno podporo izvoru vrzeli v spinskih korelacijah. S tem smo poudarili, da so ravno spinske korelacije in različni načini približevanja Mottovemu izolatorju glavni vzroki za različno obnašanje med kuprati in

organskimi superprevodniki. Rezultate smo pridobili s sodelovanjem s prof. dr. Rossom H. McKenziejem iz *University of Queensland* (Avstralija) ter jih delno objavili v reviji *Phy. Rev. Lett.*, deloma pa so še v objavi.

### **Mottov prehod kovina-izolator**

Na vprašanje kako razumeti Mottov prehod kovina-izolator smo preko inovativnega pristopa z obravnavo visoke spinske polarizacije in točnega rezultata v limiti polariziranega sistema pokazali, da je mehanizem za prehod vezava praznih (*holonov*) in dvojno zasedenih mest (*doublonov*). To bistveno prispeva k boljšemu razumevanju in opisu prehoda ter pripadajočega kritičnega obnašanja. Z uporabo BCS aproksimacije za vezavo parov in z numeričnimi izračuni preko renormalizacijske grupe gostotne matrike (DMRG) smo pokazali, da je prehod prvega reda z dokaj majhnim skokom v dvojni zasedenosti, in bistveno izboljšali dosedanje rezultate.

Pri tem smo tesno sodelovali s prof. dr. Takamijem Tohyamo iz Tokyo University of Science (Japonska), z dr. Shigetoshijem Soto iz RIKEN inštituta v Kobe (Japonska) in s skupino dr. Seijija Yunokija na RIKEN inštitutu v Wakoju (Japonska). Rezultate smo objavili v reviji *Phys. Rev. B*.

### **Termoelektričnost**

V sodelovanju s prof. dr. Rossom H. McKenziejem iz *University of Queensland* (Avstralija) smo obravnavali vpliv močnih elektronskih interakcij na termoelektričnost. Pokazali smo, da se pri prehodu iz Fermijeve tekočine v fazo slabe kovine močno poveča entropija in posledično termoelektričnost, ki ima tudi nemonotono temperaturno odvisnost z maksimumom pri temperaturi prehoda. To se dobro ujema z eksperimentom na organskih superprevodnikih, ne popiše pa orientacijske odvisnosti, za kar bi bilo potrebno vključiti dodatno dimerizacijo mreže in uporabiti Kubovo formulo. Poleg tega je povečana termoelektričnost zanimiva tudi za aplikativno uporabo pri pretvorbi med električno napetostjo in temperaturnim gradientom.

### **Režim slabe kovine in linearna odvisnost upornosti od temperature**

Z uporabo Nernst-Einsteinove relacije in numeričnega izračuna optične prevodnosti smo pokazali, da je v režimu slabe kovine pri visokih temperaturah prevodnost določena predvsem z obnašanjem nabojne susceptibilnosti, medtem ko se difuzijska konstanta le malo spreminja s temperaturo in dopiranjem. S tem smo pokazali, da je mogoče upornost razložiti s statičnimi količinami, medtem ko dinamično sipanje igra manjšo vlogo. Pokazali smo tudi, da enostaven polprevodniški model opiše obnašanje nabojne susceptibilnosti in preko nje tudi upornost linearno v temperaturi. Poudarili smo tudi, da nabojna susceptibilnost določa jakost Thomas-Fermijevega senčenja in tako igra pomembno vlogo tudi pri superprevodnosti in vezavi Cooperjevih parov. Rezultati so v objavi.

### **Faze v Mottovem izolatorju**

Ker nered v spinskih verigah poveča spinsko susceptibilnost pri nizki temperaturi, bi načeloma lahko zvišal temperaturo prehoda v antiferomagnet pri šibko sklopljenih verigah. Preko izračuna temperature prehoda za šibko sklopljene verige smo pokazali, da nered v resnici zmanjša temperaturo prehoda in ureditveni magnetni moment ter pripelje do široke porazdelitve velikosti lokalnih magnetnih momentov. Rezultati se skladajo z eksperimentalno izmerjeno temperaturo prehoda in z izmerjeno porazdelitvijo lokalnih momentov preko mionske spinske resonance. Rezultati so bili dobljeni v sodelovanju s prof. dr. Andrey-jem Zeludevom iz ETH v Zürichu (Švica) ter dr. Jacekom Herbrychom iz *University of Crete* v Heraklionu (Grčija) ter so objavljeni v reviji *Phys. Rev. B*.

Preko numeričnih simulacij Heisenbergovega modela za spine  $S=1$  na anizotropni trikotni mreži smo pojasnili, da je vrednost temperature prehoda v antiferomagnet nižja v  $\text{NaMnO}_2$  kot v  $\text{CuMnO}_2$  zaradi večje spinske frustracije v  $\text{NaMnO}_2$ , in to kljub močnejši izmenjalni interakciji v njem. Do teh ugotovitev smo prišli s tesnim sodelovanjem z eksperimentalno skupino na *Odseku za fiziko trdne snovi* na *Institutu Jožef Stefan* in jih objavili v reviji *Sci. Rep.*

V sodelovanju s prof. dr. Takamijem Tohyamo iz Tokyo University of Science (Japonska), z dr.

Shigetoshijem Soto iz *RIKEN inštituta v Kobe* (Japonska) in skupino dr. Seiji-ja Yunoki-ja na *RIKEN inštitutu v Wako-ju* (Japonska) smo pokazali, da se v Hubbardovem modelu na izotropni trikotni mreži v Mottovem izolatorju tik ob kovinski fazi pojavi nova faza, ki je dober kandidat za fazo spinske tekočine. To je npr. v nasprotju z nekaterimi drugimi trditvami, da te faze ni, in predstavlja trdne temelje za nadaljnje razumevanje te zanimive faze, v kateri zaradi kvantnih fluktuacij tudi pri temperaturi nič ni magnetne ureditve. Rezultate pripravljamo za objavo.

#### 4. Ocena stopnje realizacije programa dela na raziskovalnem projektu in zastavljenih raziskovalnih ciljev<sup>3</sup>

V prvem delu projekta smo izračunali statične količine, kot so kemijski potencial, entropija, specifična toplota, uniformna spinska susceptibilnost, nabojna susceptibilnost, dvojna zasedenost, red vezi in statični spinski strukturni faktor, ter objavili serijo ugotovitev, dobljenih iz teh rezultatov. S tem je prvi del projekta v celoti uspešno zaključen. V drugem delu projekta smo izračunali dinamične količine, kot so termoelektričnost, optična prevodnost in dinamični spinski strukturni faktor, pri čemer so ugotovitve za termoelektričnost že objavljene, za optično prevodnost so v objavi, za dinamični spinski strukturni faktor pa so v pripravi za objavo. Predvsem zaradi poudarka na pomembnih ugotovitvah, dobljenih z izračunom optične prevodnosti, je zmanjkalo časa za dokončen izračun spektralne funkcije in susceptibilnosti parov, ki še poteka in bo zaključen v prihodnosti. Ocenjujemo torej, da je bilo realiziranih vsaj 90 odstotkov predvidenih izračunov. Po drugi strani pa so dobljeni rezultati omogočili odgovor in boljše razumevanje vseh glavnih vprašanj oziroma hipotez, zastavljenih v projektu.

Razlike med organskimi superprevodniki in kuprati smo opazili npr. v kvalitativnem obnašanju nabojne susceptibilnosti, jakosti spinskih korelacij in njenemu vplivu na prevodnost ter mehanizmu za razpad vezanih parov *holon-doublon*, odgovornemu za Mottov prehod. Po drugi strani pa smo našli podobnosti v osnovnem mehanizmu za Mottov prehod in razumevanju upornosti nad temperaturo dekoherence preko nabojne susceptibilnosti. Določili smo tudi fazni diagram Hubbardovega modela na anizotropni trikotni mreži tako pri temperaturi nič, kot tudi pri končni temperaturi, in raziskali obnašanjem fizikalnih količin v posamezni fazi. Pri tem smo poudarili tudi režime parametrov modela, v katerih se pojavita fazi pseudo-energijska vrzel in spinska-tekočina. V fazi pseudo-energijske vrzeli smo našli močne kazalce, da je vzrok za to fazo v močnih spinskih korelacijah.

Preverili smo tudi, kako uspešen je model pri opisu realnih eksperimentov za organske superprevodnike, ter ugotovili, da model poleg pravega kvalitativnega faznega diagrama opiše kvantitativno mnoge eksperimentalne podatke. To daje močno podporo uporabljenemu modelu za opis organskih superprevodnikov in nadaljnjim poglobljenim študijam. Po drugi strani pa smo pokazali, da so nekatere količine zelo občutljive na detajle v materialih, in tako je npr. za točne vrednosti termoelektričnosti potrebno vključiti dodatno majhno dimerizacijo na mreži.

S tem so vsi glavni cilji tega projekta realizirani in hipoteze uspešno preverjene.

#### 5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega projekta oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine<sup>4</sup>

Spremembe programa raziskovalnega projekta oziroma projektne skupine niso bile potrebne.

#### 6. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine<sup>5</sup>

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	26760743	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Termodinamske lastnosti prehoda iz slabe kovine v Mottov izolator v prisotnosti frustracije
		ANG	Thermodynamics of a bad metal - Mott insulator transition in the presence of frustration

Opis	SLO	<p>Z izračunom termodinamskih lastnosti Hubbardovega modela na anizotropni trikotni mreži blizu izotropne točke smo v elektronski susceptibilnosti nazorno opazili prehod kovina - Mottov izolator in ocenili kritično vrednost jakosti interakcij za ta prehod pri različnih vrednostih frustracije. S tem smo določili fazni diagram, ki daje podporo določenim numeričnim metodam, kot so variacijski Monte Carlo in renormalizacijsko grupo integrala poti, medtem ko nekatere druge metode kot so 'slave rotor', teorija resonančne valenčne vezi, teorija dinamičnega povprečnega polja ter Brinkman-Rice pristop dajo občutno drugačno vrednost kritične jakosti interakcije. Na kovinski strani smo v elektronski susceptibilnosti, entropiji in specifični toploti opazili obnašanje skladno s Fermijevo tekočino in pokazali, da ta faza zvezno preide v nekoherentno fazo pri relativno nizki temperaturi dekoherence. Naši rezultati za temperaturo dekoherence in renormalizacijo kvazidelčne mase v fazi Fermijeve tekočine se skladajo z eksperimenti na organskih soleh s prenosom naboja, in tako daje podporo opisu teh dokaj kompliciranih molekularskih kristalov z relativno preprostim mikroskopskim modelom. Rezultati za spinsko susceptibilnost, entropijo in približek za dvojno zasedenost kažejo, da je v nekoherentni fazi fluktuirajoči lokalni magnetni moment velik, kar podpira sliko faze predlagane s teorijo povprečnega polja. V izolatorski fazi smo pokazali, kako frustracija poveča gostoto stanj nizko ležečih spinskih ekscitacij, kar se na primer odraža v obstoju maksimuma v specifični toploti pri temperaturi mnogo nižji od izmenjalne interakcije.</p>	
	ANG	<p>By calculating thermodynamics properties of a Hubbard model on the anisotropic triangular lattice close to the isotropic point, we clearly observe a metal-insulator transition in the charge susceptibility and estimate critical interaction strength for such transition at different extends of frustrations. Determined phase diagram gives support to other numerical methods like variational Monte Carlo and path integral renormalization group and reveals that other methods like slave rotors, resonating valence bond theory, dynamical mean field theory and Brinkman-Rice approach gives substantially different value for a critical interaction strength. In the metallic side we observed Fermi liquid like behavior in charge susceptibility, entropy and specific heat and show that this phase crosses over to incoherent (bad metallic) phase at relatively low coherence temperature. Our results for the coherence temperature and quasi-particle mass renormalization in Fermi liquid phase agree well with experiments on organic charge transfer salts, which therefore give support to the description of these rather complicated molecular crystals with relatively simple microscopic model. Results on spin susceptibility, entropy and estimate of double occupancy show that in the bad metallic phase fluctuating local magnetic moment is already large and in this way give support to the picture of this phase proposed by dynamical mean field theory. In the insulating phase we demonstrate how frustration increases density of low lying spin excitations, which is, e.g., reflected in the maximum of the specific heat being at temperatures much below the energy of an exchange interaction.</p>	
	Objavljeno v	<p>American Physical Society; Physical review letters; 2013; Vol. 110, no. 20; str. 206402-1-206402-5; Impact Factor: 7.728; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.852; A': 1; A': 1; WoS: UI; Avtorji / Authors: Kokalj Jure, McKenzie Ross H.</p>	
	Tipologija	<p>1.01 Izvirni znanstveni članek</p>	
2.	COBISS ID	28581671	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	<p>Povečan termični raztezek v organskih soleh s prenosom naboja zaradi močnih elektronskih korelacij</p>	
	ANG	<p>Enhancement of thermal expansion of organic charge-transfer salts by</p>	

		strong electronic correlations
Opis	SLO	Obravnavali smo prispevek valenčnih elektronov z močnimi korelacijami k termični razteznosti. Najprej smo izpeljali splošne termodinamske relacije za opis termične razteznosti, in jo izrazili z elastičnimi konstantami ter odvisnostjo entropije od strukturnih parametrov. Elektronski prispevek smo numerično simulirali preko Hubbardovega modela na anizotropni trikotni mreži ter preko uporabe odvisnosti Hubbardovih parametrov od strukturnih parametrov. Pokazali smo, da močne elektronske korelacije in spinska frustracija lahko za red velikosti povečajo elektronski prispevek k termični razteznosti. Poleg tega smo pokazali, da ima prispevek nemonotono temperaturno odvisnost, močno anizotropijo, režime negativnih vrednosti, maksimum pri temperaturi dekoherence kvazi delcev ali v izolatorski fazi pri temperaturi, kjer se maksimum pojavi tudi v spinski susceptibilnosti ali specifični toploti. Te lastnosti se kvalitativno ujemajo z eksperimentom, medtem ko kvantitativna primerjava in izboljšave, npr. z upoštevanjem fononskega prispevka, ostajajo predmet nadaljnjih raziskav.
	ANG	We studied the electronic contribution of valence electrons to the thermal expansion. We first derived general thermodynamic relations for description of thermal expansion and expressed it with elastic constants and dependence of entropy on structural parameters. We numerically simulated the electronic contribution via Hubbard model on the anisotropic triangular lattice and by using dependence of Hubbard parameters on the structural parameters. We showed that strong electronic correlations and spin frustration can enhance the electronic contribution to the thermal expansion by an order of magnitude. We also showed, that electronic contribution has non-monotonic temperature dependence and strong anisotropy, is negative in some regimes and has maximum at coherence temperature, while its maximum in insulating regime appears at similar temperatures as maximum in spin susceptibility and in specific heat. These properties qualitatively agree with experiment, while quantitative agreement and improvements like, e.g., including phononic contribution, remain future challenges.
Objavljeno v	The American Institute of Physics; Physical review. B, Condensed matter and materials physics; 2015; Vol. 91, no. 20; str. 205121-1- 205121-10; Impact Factor: 3.736; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.933; A': 1; WoS: UK; Avtorji / Authors: Kokalj Jure, McKenzie Ross H.	
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
3.	COBISS ID	28468519 Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Preko elektronskih korelacij povečana termoelektričnost v slabi kovini: študija Kelvinove formule
	ANG	Enhancement of the thermoelectric power by electronic correlations in bad metals
Opis	SLO	V tem delu smo pokazali kako močne elektronske korelacije povečajo termoelektričnost v slabi kovini. Z uporabo Lanczoseve numerične metode za končne temperature smo simulirali elektrone opisane s Hubbardovim modelom na trikotni mreži, ki velja za dober model elektronov v organskih superprevodnikih. Termoelektričnost smo izračunali preko Kelvinove formule in pokazali, da je termoelektričnost povečana na vrednosti blizu $k_B/e_0$ , ima nemonotono temperaturno odvisnost in maksimum blizu temperature dekoherence. Te lastnosti se dobro ujemajo z eksperimentom, medtem ko je za opis orientacijske odvisnosti in režima Fermijeve tekočine potrebno vključiti dimerizacijo in uporabiti Kubovo formulo.
		In this work we showed how strong electronic correlations enhance thermoelectric power in bad metals. By using finite-temperature Lanczos



			method we simulated electrons described by Hubbard model on the triangular lattice, which is believed to be a good model for electrons in organic superconductors. We calculated thermoelectric power via Kelvin's formula and showed that the thermoelectric power is enhanced to the values close to $k_B/e_0$ , that it has nonmonotonic temperature dependence and maximum close to coherence temperature. These properties agree nicely with the experiment, while the description of orientational dependence and a Fermi liquid regime requires inclusion of lattice dimerization and the use of a Kubo formula.
		ANG	
	Objavljeno v		The American Institute of Physics; Physical review. B, Condensed matter and materials physics; 2015; Vol. 91, no. 12; str. 125143-1-125143-5; Impact Factor: 3.736; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.933; A': 1; WoS: UK; Avtorji / Authors: Kokalj Jure, McKenzie Ross H.
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID	28533543	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Antiferromagnetni red v šibko sklopljenih spinskih verigah z neredom
		ANG	Antiferromagnetic order in weakly coupled random spin chains
	Opis	SLO	Obravnavali smo šibko sklopljene $S=1/2$ Heisenbergove spinske verige z neredom, ki ga je mogoče opisati z naključnimi vrednostmi spinske superizmenjalne interakcije. Preko numerične simulacije verig in obravnave sklopitve med verigami v približku povprečnega polja smo pokazali, da nered skladno z eksperimentom zmanjšuje temperaturo prehoda v antiferromagnet in ravno tako zmanjšuje tudi magnetni moment v urejeni fazi pri temperaturi nič. Pokazali smo tudi, da imajo lokalni magnetni momenti zaradi nereda široko porazdelitev po velikosti, kar je eksperimentalno opaženo z mionsko spinsko resonanco.
		ANG	We studied weakly coupled random $S=1/2$ Heisenberg chains with disorder that can be described with random values of super-exchange spin interactions. By using numerical simulations of chains and treating inter-chain couplings at the mean field level we showed that in agreement with experiment the disorder reduces the transition temperature into antiferromagnet as well as the ordered magnetic moment at zero temperature. We also showed that the local magnetic moments have a wide distribution of sizes, which has been experimentally observed with muon spin resonance.
	Objavljeno v		The American Institute of Physics; Physical review. B, Condensed matter and materials physics; 2015; Vol. 91, no. 15; str. 155147-1-155147-7; Impact Factor: 3.736; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.933; A': 1; WoS: UK; Avtorji / Authors: Kokalj Jure, Herbrych Jacek, Zheludev A., Prelovšek Peter
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
5.	COBISS ID	29184551	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Vezava holon-doublon kot mehanizem za Mottov prehod
		ANG	Holon-doublon binding as the mechanism for the Mott transition
	Opis	SLO	Preko obravnave Hubbardovega modela v limiti maksimalne spinske polarizacije, ki omogoča točne rešitve, smo pokazali, da je mehanizem Mottovega prehoda kovina-izolator vezava praznih (holonov) in dvojno zasedenih mest (doublonov). Z razširitvijo študije proti nepolariziranemu sistemu in z uporabo približka podobnemu BCS približku, približka naključne poti in numerične Lanczoseve metode smo pokazali, da je prehod nezvezen, in da se vezava holona in doublona opazi v gostotnih korelacijah.
			By studying the Hubbard model in a limit of maximal spin polarization,

	ANG	which allows for exact solution, we showed that the mechanism behind the Mott metal-insulator transition is the holon-doublon binding. By extending the study towards nonpolarized systems and by using BCS-type approximation, random path approximation and numerical Lanczos method we show, that the transition is discontinuous and that the binding of a holon to a doublon is indicated in the density correlations.
Objavljeno v		The American Institute of Physics; Physical review. B, Condensed matter and materials physics; 2015; Vol. 92, no. 23; str. 35155-1-35155-6; Impact Factor: 3.736; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.933; A': 1; WoS: UK; Avtorji / Authors: Prelovšek Peter, Kokalj Jure, Lenarčič Zala, McKenzie Ross H.
Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek

### 7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati projektne skupine<sup>6</sup>

Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	27076647 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO Termodinamika prehoda iz kovine v izolator v organskih soleh s prenosom naboja ANG Thermodynamics of a metal-insulator transition in organic charge transfer salts
	Opis	SLO Nosilec projekta je imel vabljen predavanje z naslovom "Termodinamika prehoda iz kovine v izolator v organskih soleh s prenosom naboja" na konferenci "LEMSUPER Conference on Mechanisms and Developments in Light-Element Based and Other Novel Superconductors" v mednarodnem centru za teoretično fiziko (ICTP) v Trstu, 25. sep. 2013. ANG Principle investigator gave invited talk "Thermodynamics of a metal-insulator transition in organic charge transfer salts" at the conference "LEMSUPER Conference on Mechanisms and Developments in Light-Element Based and Other Novel Superconductors" at International Center for Theoretical physics (ICTP) in Trieste on 25. Sep. 2013.
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci
	Objavljeno v	2013; Avtorji / Authors: Kokalj Jure
	Tipologija	3.16 Vabljen predavanje na konferenci brez natisa
2.	COBISS ID	27423271 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO Termodinamske lastnosti modela za organske soli s prenosom naboja ANG Thermodynamic properties of a model for organic charge-transfer salts
	Opis	SLO Nosilec projekta je imel vabljen predavanje z naslovom "Termodinamske lastnosti modela za organske soli s prenosom naboja" na Yukawa inštitutu za teoretično fiziko v Kyotu (Japonska) 21. jan. 2014. Predavanje je bilo v času pet tedenskega gostovanja na Yukawa inštitutu v okviru programa za mednarodne izmenjave, ki ga vodi Univerza v Kyotu. Nosilec projekta je imel tudi vabljen predavanje na Naprednem inštitutu za računske znanosti znotraj RIKEN inštituta v Kobe (Japonska) 6. feb. 2014 [COBISS.SI-ID 27464487]. ANG Principle investigator gave invited lecture "Thermodynamic properties of a model for organic charge-transfer salts" at the Yukawa institute for Theoretical Physics in Kyoto (Japan) on 21. January 2014. The lecture was given during the five-week hosted research at Yukawa institute supported by the International exchange program lead by University of Kyoto. Principle investigator also gave an invited lecture at the Advanced Institute

		for Computational Science, RIKEN in Kobe (Japan) on 6. February 2014 [COBISS.SI-ID 27464487].
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje
	Objavljeno v	Kyoto University, Yukawa Institute for Theoretical Physics; 2014; Avtorji / Authors: Kokalj Jure
	Tipologija	3.14 Predavanje na tuji univerzi
3.	COBISS ID	28866343 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Obnašanje kot slaba kovina v dopiranih Mottovih izolatorjih
		<i>ANG</i> Bad-metallic behavior of doped Mott insulators
	Opis	<i>SLO</i> Nosilec projekta je predstavil poster z naslovom "Obnašanje kot slaba kovina v dopiranih Mottovih izolatorjih" na mednarodni konferenci "6th International Conference: The New Generation in Strongly Correlated Electron systems", ki je od 14. do 18. septembra 2015 potekala v Trogirju na Hrvaškem. <i>SLO</i> Nosilec projekta je predstavil tudi poster z naslovom "Termodinamske lastnosti Hubbardovega modela na anizotropni trikotni mreži blizu prehoda iz slabe kovine v Mottov izolator" na šoli "School on Quantum spin liquids: from theory to numerical simulations", ki je od 9. do 20. septembra 2013 potekala na mednarodni šoli za napredne študije (SISSA) v Trstu [COBISS.SI-ID 27024679].
		<i>ANG</i> Principle investigator presented a poster "Bad-metallic behavior of doped Mott insulators" at the international conference "6th International Conference: The New Generation in Strongly Correlated Electron systems" which took place in Trogir, Croatia, from 14-18. Sep. 2015. <i>ANG</i> Principle investigator also presented a poster "Hubbard model on the anisotropic triangular lattice near the bad metal-Mott insulator transition" at the "School on Quantum spin liquids: from theory to numerical simulations" which took place at International School for Advanced Studies (SISSA) in Trieste from 9-20. Sep. 2013 [COBISS.SI-ID 27024679].
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci
	Objavljeno v	s. n.]; Book of abstracts; 2015; Str. 25; Avtorji / Authors: Kokalj Jure
	Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci
4.	COBISS ID	28895271 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Upornost linearna v temperaturi v Mottovih izolatorjih pri visokih temperaturah kot statičen efekt
		<i>ANG</i> Linear-in-temperature resistivity of doped Mott insulator at high temperatures as a static effect
	Opis	<i>SLO</i> Principle investigator gave an invited lecture "Linear-in-temperature resistivity of doped Mott insulator at high temperatures as a static effect" at the Crete Center for Quantum Complexity and Nanotechnology, University of Crete, in Heraklion (Greece) on 29th September 2015. <i>ANG</i> Nosilec projekta je imel vabljen predavanje z naslovom "Upornost linearna v temperaturi v Mottovih izolatorjih pri visokih temperaturah kot statičen efekt" v Crete Center for Quantum Complexity and Nanotechnology znotraj Univerze na Kreti v Heraklionu (Grčija) 29. sep. 2015.
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje
	Objavljeno v	University of Crete, Crete Center for Quantum Complexity and Nanotechnology; 2015; Avtorji / Authors: Kokalj Jure
	Tipologija	3.14 Predavanje na tuji univerzi
5.	COBISS ID	29279527 Vir: COBISS.SI

Naslov	SLO	Naboja susceptibilnost in obnašanje kot slaba kovina v dopiranem Mottovem izolatorju
	ANG	Charge susceptibility and bad metallic behavior of doped Mott insulator
Opis	SLO	Nosilec projekta je imel vabljen predavanje z naslovom "Naboja susceptibilnost in obnašanje kot slaba kovina v dopiranem Mottovem izolatorju" na Tokijski univerzi za znanost v Tokiju (Japonska) 8. feb. 2016. Nosilec projekta je tudi imel vabljen predavanje na RIKEN Inštitutu za napredno znanost v Wako (Japonska) 12. feb. 2016 [COBISS.SI-ID 29288743].
	ANG	Principle investigator gave invited talk "Charge susceptibility and bad metallic behavior of doped Mott insulator" at the Tokyo University of Science in Tokyo (Japan) on 8th Feb. 2016. Principle investigator also gave an invited talk at the RIKEN, Advanced Science Institute in Wako (Japan) on 12th Feb. 2016 [COBISS.SI-ID 29288743].
Šifra	B.04	Vabljen predavanje
Objavljeno v	2016; Avtorji / Authors: Kokalj Jure	
Tipologija	3.14	Predavanje na tuji univerzi

## 8. Drugi pomembni rezultati projektne skupine<sup>2</sup>

Delo na projektu je močno okrepilo sodelovanje z raziskovalnimi skupinami v tujini ter vzpostavilo sodelovanje z nekaterimi novimi raziskovalnimi skupinami. Tako smo v okviru projekta tesno sodelovali s skupinami, delujočimi v School of Mathematics and Physics, University of Queensland, Brisbane (Avstralija), Yukawa institute for theoretical physics, Kyoto (Japonska), Computational Materials Science Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science, Kobe (Japonska), Department of Applied Physics, Tokyo University of Science, Tokyo (Japonska), Computational Condensed Matter Physics Laboratory, RIKEN, Wako (Japonska), Crete Center for Quantum Complexity and Nanotechnology, Department of Physics, University of Crete, Heraklion (Grčija) ter Neutron Scattering and Magnetism, Laboratory for Solid State Physics, ETH Zürich (Švica).

Prav tako se je zaradi projekta okrepilo sodelovanje med skupinami znotraj Inštituta Jožefa Stefana, saj smo npr. tesno sodelovali z eksperimentalno skupino na Odseku za fiziko trdne snovi.

V okviru dela na projektu in sodelovanja s skupinami v tujini je bil nosilec projekta na pettedenskem obisku Yukawa instituta za teoretično fiziko, Kyoto (Japonska), na desetdnevem obisku Univerze na Kreti, Heraklion (Grčija) ter enotedenskem obisku Tokijske univerze za znanost, Tokyo (Japonska). Vsi obiski so bili v celoti financirani s strani gostiteljev.

## 9. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine<sup>3</sup>

### 9.1. Pomen za razvoj znanosti<sup>2</sup>

SLO

V tem projektu smo obravnavali močno interagirajoče elektrone, ki predstavljajo osrednji izziv za teorijo fizike kondenzirane snovi. Preko inovativnega in točnega pristopa s strani visoke spinske polarizacije smo pokazali, da je osnovni mehanizem Mottovega prehoda v spremembi nevezanih parov praznih (holon) in dvojno zasedenih (doublon) mest v vezane pare. To bistveno prispeva k razumevanju prehoda in daje osnovo za nadaljnje razumevanje prehoda in njegovih lastnosti, vključno s kritičnim obnašanjem.

Preko izračuna večjega števila fizikalnih količin smo določili fazni diagram Hubbardovega modela na anizotropni trikotni mreži in lastnosti posameznih faz. To bistveno pripomore k teoretičnemu razumevanju in opisu faznega diagrama ter posameznih faz, kar je bistvenega pomena za nadaljnje natančnejše proučevanje posameznih faz, njihovih lastnosti ter primerjavo z eksperimentalnimi podatki. Med drugimi smo določili tudi območje bolj kontroverznih faz, kot

sta spinska tekočina in faza pseudo-energijske vrzeli.

Nadaljnje smo na modelu izračunane količine primerjali z eksperimentalnimi podatki za organske superprevodnike in večinoma dobili zelo dobro kvantitativno ujemanje. To daje trdno podporo uporabljenemu mikroskopskemu modelu za organske superprevodnike, kar predstavlja trden temelj za nadaljnje teoretične raziskave teh materialov. Hkrati pa smo poudarili, da je za opis določenih lastnosti potrebno model nadgraditi, npr. za pravilen opis termoelektričnosti je potrebno upoštevati dimerizacijo prekrivalnih integralov na trikotni mreži. Med drugimi smo pokazali tudi, da je termoelektrični efekt povečan pri prehodu iz Fermijeve tekočine v slabo kovinsko fazo, kar je zanimivo tudi za aplikativno pretvorbo med električno napetostjo in temperaturnim gradientom.

Preko izračuna optične prevodnosti, nabojne susceptibilnosti in difuzijske konstante v bližini Mottovega prehoda smo ugotovili, da je v fazi slabe kovine in pri visokih temperaturah prevodnost mogoče razumeti preko obnašanja nabojne susceptibilnosti. Preko te enostavnejše in bolj fundamentalne količine je namreč možno razumeti tako močno odvisnost upornosti od dopiranja, kot tudi njeno linearnost v temperaturi ter kršitev Mott-Ioffe-Regel limite. Pokazali smo tudi, da spinske korelacije povečajo nabojno susceptibilnost v dopiranem izolatorju in posledično zmanjšajo upornost, kar smo predlagali za možno razlago pseudo-energijskega obnašanja v upornosti. Predlagana nova slika bistveno pripomore k razumevanju faze slabe kovine preko enostavnejših količin, zato upamo, da bo stimulirala nadaljnje teoretične, še bolj pa natančnejše eksperimentalne verifikacije.

Pomembnost znanstvenih ugotovitev se že odraža preko objav v uglednih mednarodnih revijah, mednarodnemu odzivu in večjemu številu vabljenih predavanj.

ANG

Within this project we studied the strongly interacting electrons, which present the central challenge for the theory of condensed matter. By using the novel and exact approach from the strongly spin polarized system, we showed that the main mechanism for the Mott transition is the binding and unbinding of holon-doublon pairs. This strongly advances our understanding of the transition and gives a foundation for further understanding of the transition and its properties, including its critical behaviour.

By calculating a number of physical quantities we determined the phase diagram of the Hubbard model on the anisotropic triangular lattice and the properties of various phases. This considerably improves the theoretical understanding and description of the phase diagram and phases within, which is important for the further and more precise investigation of each phase, their properties and for the comparison with experimental data. Among other phases we also determined the regimes of more controversial spin liquid and pseudogap phase.

Further on we compared within the model-calculated quantities with the experimental data for the organic superconductors and mostly obtained very good quantitative agreement. This gives a firm support to the description of the organic superconductors with the used microscopic model, which presents firm foundation for the future theoretical studies of these materials. On the other hand, we stressed that for the description and understanding of certain properties, the model needs to be upgraded, e.g., for the proper description of thermoelectricity one needs to include the dimerization of transfer integrals on the triangular lattice. In addition we showed that the thermoelectric effect is enhanced at the transition from the Fermi liquid to the bad-metallic phase, which is interesting also for the applications for conversion between electric voltage and temperature gradient.

By calculations of optical conductivity, charge susceptibility and diffusion constant close to a Mott transition, we show that in the bad-metallic phase and at high temperatures the conductivity can be understood by the behaviour of the charge susceptibility. Via this simpler and more fundamental quantity one can understand the strong dependence of the resistivity on doping, as well as its linearity in temperature and the violation of the Mott-Ioffe-Regel limit. We also showed that the spin correlations increase the charge susceptibility, which leads to decreased resistivity and suggest this as a possible explanation of pseudogap signatures in the resistivity. Suggested picture considerably improves our understanding of bad-metallic behaviour via simpler quantities and we hope, it will stimulate further theoretical, and even

more, more precise experimental verifications.

Relevance of the scientific results is already reflected by the publications in the respected international journals, international response and larger number of invited talks.

## 9.2. Pomen za razvoj Slovenije<sup>10</sup>

SLO

Dodatno znanje in razumevanje materialov z močno interagirajočimi elektroni, ki je bilo pridobljeno v tem projektu, pripomore k potencialni aplikativni uporabi teh materialov, npr. kot termoelektriki ali visokotemperaturni superprevodniki.

Preko dela na projektu smo vzpostavili tesno sodelovanje s tujimi raziskovalci, ki delujejo na University of Queensland, Brisbane (Avstralija), Yukawa institute for theoretical physics, Kyoto (Japonska), RIKEN Advanced Institute for Computational Science, Kobe (Japonska), Tokyo University of Science, Tokyo (Japonska), RIKEN, Wako (Japonska), University of Crete, Heraklion (Grčija) ter ETH Zürich (Švica). To omogoča dostop do tujih znanj in ekspertiz ter pridobitev boljših rezultatov preko kombinacije domačega in tujega znanja. Poleg tega smo v okviru projekta vzpostavili tudi sodelovanje z dvema eksperimentalnima skupinama, eno na ETH Zürich (Švica) in drugo na Institutu Jožef Stefan, kar omogoča nadgradnjo razumevanja preko sodelovanja med eksperimentom in teorijo.

Vse to bistveno pripomore k ugledu ter prepoznavnosti slovenske znanosti, k čemer dodatno pripomorejo objave v mednarodnih revijah, pridobljeni citati ter predstavitve v tujini. S tem se povečuje možnost pridobitve tujih (npr. evropskih) projektov, povečuje pa se tudi privlačnost Slovenije za tuje raziskovalce in študente.

ANG

The knowledge and better understanding of the materials with strongly interacting electrons obtained within this project helps towards potential application of these materials, e.g., as thermoelectric or high-temperature superconductors. The project established firm collaborations with foreign researches working at the University of Queensland, Brisbane (Australia), Yukawa institute for theoretical physics, Kyoto (Japan), RIKEN Advanced Institute for Computational Science, Kobe (Japan), Tokyo University of Science, Tokyo (Japan), RIKEN, Wako (Japan), University of Crete, Heraklion (Greece) and ETH Zürich (Switzerland). This makes the foreign knowledge and expertise accessible and allows for the better results via combination of local and foreign knowledge. In addition we established within this project also the collaborations with two experimental groups, one at the ETH Zürich (Switzerland) and the other at the Institute Jožef Stefan, which allows for the advances in understanding by cooperation between the theory and the experiment.

All this considerably improves the visibility and recognition of Slovenian science, which is further supported by publications in international journals, citations and presentations abroad. This increases the possibility of acquiring international (e.g. European) projects and makes Slovenia more attractive for foreign researches and students.

## 10. Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!

**Označite, katerega od navedenih ciljev ste si zastavili pri projektu, katere konkretne rezultate ste dosegli in v kakšni meri so doseženi rezultati uporabljeni**

Cilj		
<b>F.01</b>	<b>Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.02</b>	<b>Pridobitev novih znanstvenih spoznanj</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

<b>F.03</b>	<b>Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.04</b>	<b>Dvig tehnološke ravni</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.05</b>	<b>Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.06</b>	<b>Razvoj novega izdelka</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.07</b>	<b>Izboljšanje obstoječega izdelka</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.08</b>	<b>Razvoj in izdelava prototipa</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.09</b>	<b>Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.10</b>	<b>Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.11</b>	<b>Razvoj nove storitve</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.12</b>	<b>Izboljšanje obstoječe storitve</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.13</b>	<b>Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.14</b>	<b>Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.15</b>	<b>Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.16</b>	<b>Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.17</b>	<b>Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.18</b>	<b>Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.19</b>	<b>Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.20</b>	<b>Ustanovitev novega podjetja ("spin off")</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.21</b>	<b>Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>



	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.22</b>	<b>Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.23</b>	<b>Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.24</b>	<b>Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.25</b>	<b>Razvoj novih organizacijskih in upravljavskih rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.26</b>	<b>Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljavskih rešitev</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.27</b>	<b>Prispevek k ohranjanju/varovanju naravne in kulturne dediščine</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.28</b>	<b>Priprava/organizacija razstave</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.29</b>	<b>Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.30</b>	<b>Strokovna ocena stanja</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

<b>F.31</b>	<b>Razvoj standardov</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.32</b>	<b>Mednarodni patent</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.33</b>	<b>Patent v Sloveniji</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.34</b>	<b>Svetovalna dejavnost</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
<b>F.35</b>	<b>Drugo</b>	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

**Komentar**

--

**11. Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!**  
**Označite potencialne vplive oziroma učinke vaših rezultatov na navedena področja**

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
<b>G.01</b>	<b>Razvoj visokošolskega izobraževanja</b>					
G.01.01.	Razvoj dodiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.03.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.02</b>	<b>Gospodarski razvoj</b>					
G.02.01	Razširitev ponudbe novih izdelkov/storitev na trgu	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.02.	Širitev obstoječih trgov	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.03.	Znižanje stroškov proizvodnje	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

G.02.07.	Večji delež izvoza	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.08.	Povečanje dobička	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.09.	Nova delovna mesta	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.12.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.03</b>	<b>Tehnološki razvoj</b>					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.04.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.04</b>	<b>Družbeni razvoj</b>					
G.04.01	Dvig kvalitete življenja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.02.	Izboljšanje vodenja in upravljanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.03.	Izboljšanje delovanja administracije in javne uprave	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.04.	Razvoj socialnih dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.05.	Razvoj civilne družbe	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.06.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.05.</b>	<b>Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in identitete</b>					
<b>G.06.</b>	<b>Varovanje okolja in trajnostni razvoj</b>					
<b>G.07</b>	<b>Razvoj družbene infrastrukture</b>					
G.07.01.	Informacijsko-komunikacijska infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.02.	Prometna infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.03.	Energetska infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.04.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
<b>G.08.</b>	<b>Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva</b>					
<b>G.09.</b>	<b>Drugo:</b>					

**Komentar**

--

**12.Pomen raziskovanja za sofinancerje<sup>11</sup>**

	Sofinancer	
1.	Naziv	
	Naslov	

Vrednost sofinanciranja za celotno obdobje trajanja projekta je znašala:		EUR
Odstotek od utemeljenih stroškov projekta:		%
Najpomembnejši rezultati raziskovanja za sofinancerja		Šifra
	1.	
	2.	
	3.	
	4.	
	5.	
Komentar		
Ocena		

### 13. Izjemni dosežek v letu 2015<sup>12</sup>

#### 13.1. Izjemni znanstveni dosežek

#### 13.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

## C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

- so vsi podatki, ki jih navajamo v poročilu, resnični in točni
- se strinjamo z obdelavo podatkov v skladu z zakonodajo o varstvu osebnih podatkov za potrebe ocenjevanja ter obdelavo teh podatkov za evidence ARRS
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v pisni obliki
- so z vsebino zaključnega poročila seznanjeni in se strinjajo vsi soizvajalci projekta

### Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba  
raziskovalne organizacije:*

in

*vodja raziskovalnega projekta:*

Institut "Jožef Stefan"

Jure Kokalj

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

**ŽIG**

Datum:

15.3.2016

**Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2016/22**

<sup>1</sup> Napišite povzetek raziskovalnega projekta (največ 3.000 znakov v slovenskem in angleškem jeziku) [Nazaj](#)

<sup>2</sup> Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja, rezultate in učinke raziskovalnega projekta in njihovo uporabo ter sodelovanje s tujimi partnerji. Največ 12.000 znakov vključno s presledki (približno dve strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>3</sup> Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikost pisave 11)

## [Nazaj](#)

<sup>4</sup> V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa raziskovalnega projekta, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega projekta oziroma v primeru sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine v zadnjem letu izvajanja projekta, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

<sup>5</sup> Navedite znanstvene dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'. [Nazaj](#)

<sup>6</sup> Navedite družbeno-ekonomske dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Družbeno-ekonomski rezultat iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'.

Družbeno-ekonomski dosežek je po svoji strukturi drugačen kot znanstveni dosežek. Povzetek znanstvenega dosežka je praviloma povzetek bibliografske enote (članka, knjige), v kateri je dosežek objavljen.

Povzetek družbeno-ekonomskega dosežka praviloma ni povzetek bibliografske enote, ki ta dosežek dokumentira, ker je dosežek sklop več rezultatov raziskovanja, ki je lahko dokumentiran v različnih bibliografskih enotah. COBISS ID zato ni enoznačen, izjemoma pa ga lahko tudi ni (npr. prehod mlajših sodelavcev v gospodarstvo na pomembnih raziskovalnih nalogah, ali ustanovitev podjetja kot rezultat projekta ... - v obeh primerih ni COBISS ID). [Nazaj](#)

<sup>7</sup> Navedite rezultate raziskovalnega projekta iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ni voden v sistemu COBISS). Največ 2.000 znakov, vključno s presledki. [Nazaj](#)

<sup>8</sup> Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://sicris.izum.si/> za posamezen projekt, ki je predmet poročanja [Nazaj](#)

<sup>9</sup> Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

<sup>10</sup> Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

<sup>11</sup> Rubrike izpolnite / prepisite skladno z obrazcem "izjava sofinancerja" <http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>, ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisan obrazec "Izjava sofinancerja" pridobi in hrani nosilna raziskovalna organizacija – izvajalka projekta. [Nazaj](#)

<sup>12</sup> Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega projekta v letu 2015 (največ 1000 znakov, vključno s presledki). Za dosežek pripravite diapozitiv, ki vsebuje sliko ali drugo slikovno gradivo v zvezi z izjemnim dosežkom (velikost pisave najmanj 16, približno pol strani) in opis izjemnega dosežka (velikost pisave 12, približno pol strani). Diapozitiv/-a priložite kot priložitev/-i k temu poročilu. Vzorec diapozitiva je objavljen na spletni strani ARRS <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/>, predstavitev dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-RPROJ-ZP/2016 v1.00

2C-47-9E-56-3E-45-DE-D7-69-9C-7F-C3-11-DD-74-62-57-58-C6-0F