

# Teoretické štúdium fázových prechodov v silne korelovaných elektrónových systémoch

Martin Žonda

24. Júna 2008

- Aktuálna problematika

**Obsah**  
Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK  
Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

- Aktuálna problematika
  - ◆ Motivácia

<b>Obsah</b>
Silne korelované elektrónové systémy
MFK
Metóda
Tepelná kapacita
Kritické teploty
Distribúcia $F$
DOS
Homogénna fáza
Záver
Doktorandské štúdium

- Aktuálna problematika
  - ◆ Motivácia
    - Silne korelované elektrónové systémy (SKES)
    - Model Falicova-Kimballa (MFK) - úvod

## Obsah

Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK  
Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

- Aktuálna problematika
  - ◆ Motivácia
    - Silne korelované elektrónové systémy (SKES)
    - Model Falicova-Kimballa (MFK) - úvod
  - ◆ Metóda

## Obsah

Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK  
Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

- Aktuálna problematika
  - ◆ Motivácia
    - Silne korelované elektrónové systémy (SKES)
    - Model Falicova-Kimballa (MFK) - úvod
  - ◆ Metóda
  - ◆ Fázové prechody v 3D MFK

## Obsah

Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK  
Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

- Aktuálna problematika
  - ◆ Motivácia
    - Silne korelované elektrónové systémy (SKES)
    - Model Falicova-Kimballa (MFK) - úvod
  - ◆ Metóda
  - ◆ Fázové prechody v 3D MFK
  - ◆ Záver

## Obsah

Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK  
Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

- Aktuálna problematika
  - ◆ Motivácia
    - Silne korelované elektrónové systémy (SKES)
    - Model Falicova-Kimballa (MFK) - úvod
  - ◆ Metóda
  - ◆ Fázové prechody v 3D MFK
  - ◆ Záver
- Doktorandské štúdium na konci tretieho ročníka

## Obsah

Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK  
Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium



# Silne korelované elektrónové systémy

- Materiály, na ktorých vlastnosti má zásadný vplyv coulombovská interakcia medzi elektrónmi

Obsah

Silne korelované elektrónové systémy

MFK

Metóda

Tepelná kapacita

Kritické teploty

Distribúcia  $F$

DOS

Homogénna fáza

Záver

Doktorandské štúdium

# Silne korelované elektrónové systémy

- Materiály, na ktorých vlastnosti má zásadný vplyv coulombovská interakcia medzi elektrónmi
- Dobrým príkladom sú ťažkofermiónové systémy a zlúčeniny prechodových kovov (Mottove izolátory)

Obsah

Silne korelované elektrónové systémy

MFK

Metóda

Tepelná kapacita

Kritické teploty

Distribúcia  $F$

DOS

Homogénna fáza

Záver

Doktorandské štúdium

# Silne korelované elektrónové systémy

- Materiály, na ktorých vlastnosti má zásadný vplyv coulombovská interakcia medzi elektrónmi
- Dobrým príkladom sú ťažkofermiónové systémy a zlúčeniny prechodových kovov (Mottove izolátory)
- Niektoré vlastnosti SKES: exotické nábojové a spinové usporiadania, prechody kov-izolátor, valenčné prechody, zmiešaná valenčnosť, kolosálna magnetoresistencia, feroelektricitá, vysokoteplotná supravodivosť ...

Obsah

Silne korelované elektrónové systémy

MFK

Metóda

Tepelná kapacita

Kritické teploty

Distribúcia  $F$

DOS

Homogénna fáza

Záver

Doktorandské

štúdium

# Silne korelované elektrónové systémy

- Materiály, na ktorých vlastnosti má zásadný vplyv coulombovská interakcia medzi elektrónmi
- Dobrým príkladom sú ťažkofermiónové systémy a zlúčeniny prechodových kovov (Mottove izolátory)
- Niektoré vlastnosti SKES: exotické nábojové a spinové usporiadania, prechody kov-izolátor, valenčné prechody, zmiešaná valenčnosť, kolosálna magnetoresistencia, feroelektricitá, vysokoteplotná supravodivosť ...
- Je extrémne náročné teoreticky popísať tieto systémy

Obsah

Silne korelované elektrónové systémy

MFK

Metóda

Tepelná kapacita

Kritické teploty

Distribúcia  $F$

DOS

Homogénna fáza

Záver

Doktorandské

štúdium

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} d_i^+ d_j + U \sum_i f_i^+ f_i d_i^+ d_i + E_f \sum_i f_i^+ f_i,$$

kde  $d_i^+, d_i$  ( $f_i^+, f_i$ ) sú kreačný a anihilačný operátor  $d$  ( $f$ ) elek. na polohe  $i$

- Napriek jednoduchosti dokáže MFK popísať viaceré vlastnosti reálnych materiálov.

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy

**MFK**

Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} d_i^+ d_j + U \sum_i f_i^+ f_i d_i^+ d_i + E_f \sum_i f_i^+ f_i,$$

kde  $d_i^+, d_i$  ( $f_i^+, f_i$ ) sú kreačný a anihilačný operátor  $d$  ( $f$ ) elek. na polohe  $i$

- Napriek jednoduchosti dokáže MFK popísať viaceré vlastnosti reálnych materiálov.
- Väčšina doterajších výsledkov bola ale získaná pre  $D = 1, 2$  alebo  $D = \infty$ !

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy

**MFK**

Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} d_i^+ d_j + U \sum_i f_i^+ f_i d_i^+ d_i + E_f \sum_i f_i^+ f_i,$$

kde  $d_i^+, d_i$  ( $f_i^+, f_i$ ) sú kreačný a anihilačný operátor  $d$  ( $f$ ) elek. na polohe  $i$

- Napriek jednoduchosti dokáže MFK popísať viaceré vlastnosti reálnych materiálov.
- Väčšina doterajších výsledkov bola ale získaná pre  $D = 1, 2$  alebo  $D = \infty$ !
- Zásadné otázky:

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy

**MFK**

Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} d_i^+ d_j + U \sum_i f_i^+ f_i d_i^+ d_i + E_f \sum_i f_i^+ f_i,$$

kde  $d_i^+, d_i$  ( $f_i^+, f_i$ ) sú kreačný a anihilačný operátor  $d$  ( $f$ ) elek. na polohe  $i$

- Napriek jednoduchosti dokáže MFK popísať viaceré vlastnosti reálnych materiálov.
- Väčšina doterajších výsledkov bola ale získaná pre  $D = 1, 2$  alebo  $D = \infty$ !
- Zásadné otázky:
  - ◆ Je možné závery získané pre  $D = 1, 2, \infty$  použiť pre popis reálnych ( $D = 3$ ) materiálov?

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy

**MFK**

Metóda

Tepelná kapacita

Kritické teploty

Distribúcia  $F$

DOS

Homogénna fáza

Záver

Doktorandské  
štúdium



$$H = \sum_{i,j} t_{ij} d_i^+ d_j + U \sum_i f_i^+ f_i d_i^+ d_i + E_f \sum_i f_i^+ f_i,$$

kde  $d_i^+, d_i$  ( $f_i^+, f_i$ ) sú kreačný a anihilačný operátor  $d$  ( $f$ ) elek. na polohe  $i$

- Napriek jednoduchosti dokáže MFK popísať viaceré vlastnosti reálnych materiálov.
- Väčšina doterajších výsledkov bola ale získaná pre  $D = 1, 2$  alebo  $D = \infty$ !
- Zásadné otázky:
  - ◆ Je možné závery získané pre  $D = 1, 2, \infty$  použiť pre popis reálnych ( $D = 3$ ) materiálov?
  - ◆ Ako veľmi sa líšia vlastnosti MKF v jednotlivých dimenziách?

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy

**MFK**

Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

- Na štúdium termodynamických vlastností MFK je možné použiť klasické Monte-Carlo (MC) pretože:

$$H = \sum_{i,j} h_{ij}(w) d_i^+ d_j + E_f N_f, \text{ kde}$$
$$h_{ij}(w) = t_{ij} + U w_i \delta_{ij}.$$

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK

## Metóda

Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

- Na štúdium termodynamických vlastností MFK je možné použiť klasické Monte-Carlo (MC) pretože:

$$H = \sum_{i,j} h_{ij}(w) d_i^+ d_j + E_f N_f, \text{ kde}$$
$$h_{ij}(w) = t_{ij} + U w_i \delta_{ij}.$$

- Ako váhu je nutné použiť tzv. elektrónovú voľnú energiu:

$$F(w) = (E_f - \mu) N_f - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$$

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK

## Metóda

Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

- Na štúdium termodynamických vlastností MFK je možné použiť klasické Monte-Carlo (MC) pretože:

$$H = \sum_{i,j} h_{ij}(w) d_i^+ d_j + E_f N_f, \text{ kde}$$
$$h_{ij}(w) = t_{ij} + U w_i \delta_{ij}.$$

- Ako váhu je nutné použiť tzv. elektrónovú voľnú energiu:

$$F(w) = (E_f - \mu) N_f - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$$

- Pozor, ide o grand-kanonický súbor! Zásadnou komplikáciou je potreba stanoviť chemický potenciál pre každú teplotu. Aj preto sme študovali symetrický prípad:  $(\mu = U/2, E_f = 0)$

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK

## Metóda

Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

- Na štúdium termodynamických vlastností MFK je možné použiť klasické Monte-Carlo (MC) pretože:

$$H = \sum_{i,j} h_{ij}(w) d_i^+ d_j + E_f N_f, \text{ kde}$$
$$h_{ij}(w) = t_{ij} + U w_i \delta_{ij}.$$

- Ako váhu je nutné použiť tzv. elektrónovú voľnú energiu:

$$F(w) = (E_f - \mu) N_f - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$$

- Pozor, ide o grand-kanonický súbor! Zásadnou komplikáciou je potreba stanoviť chemický potenciál pre každú teplotu. Aj preto sme študovali symetrický prípad:

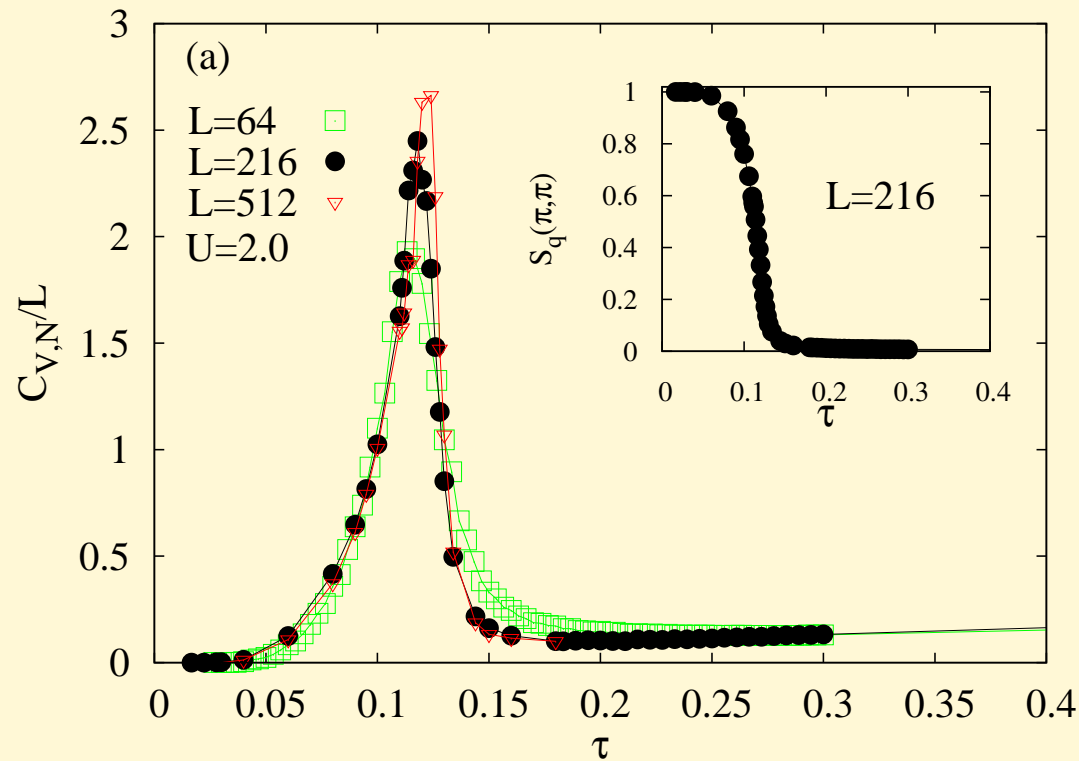
$$(\mu = U/2, E_f = 0)$$

- Základným stavom je šachovnicové usporiadanie lokalizovaných častíc.

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK

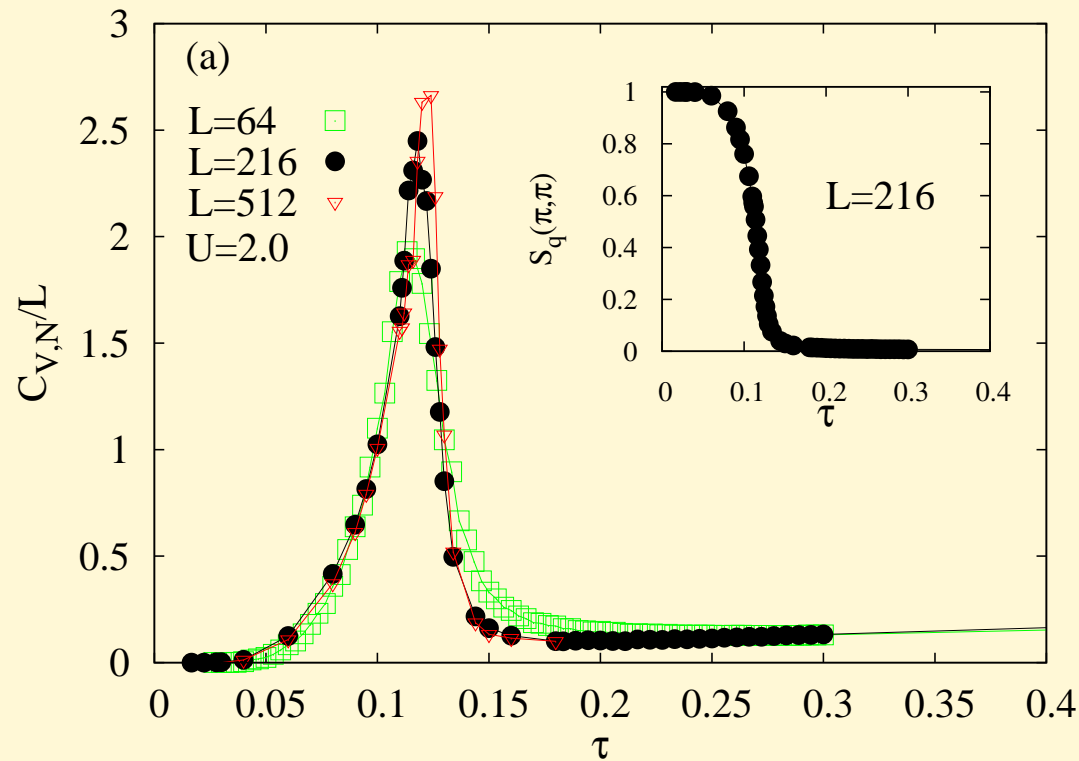
## Metóda

Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium



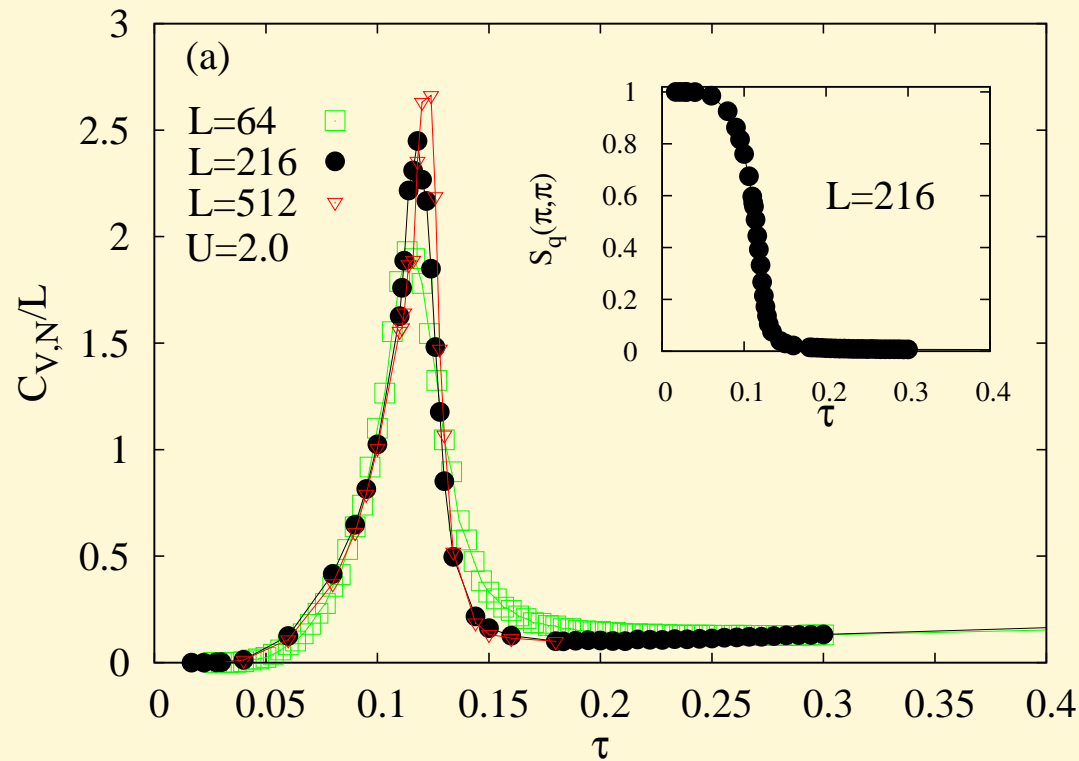
■ 
$$S_q^w(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2L} \sum_{j,k} e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} (w_j w_k)$$

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita**
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium



- $S_q^w(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2L} \sum_{j,k} e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} (w_j w_k)$
- Nízko teplotné maximum sa objavuje pri teplotách, kde sa štruktúrny faktor mení z 1 na  $\sim 0$ .

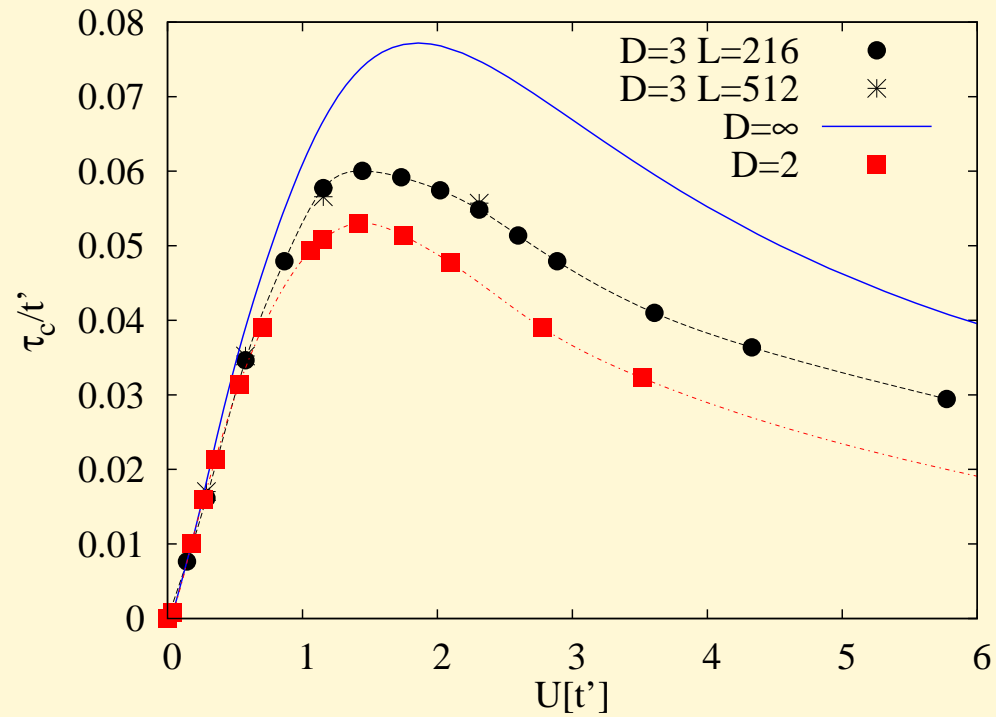
- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita**
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium



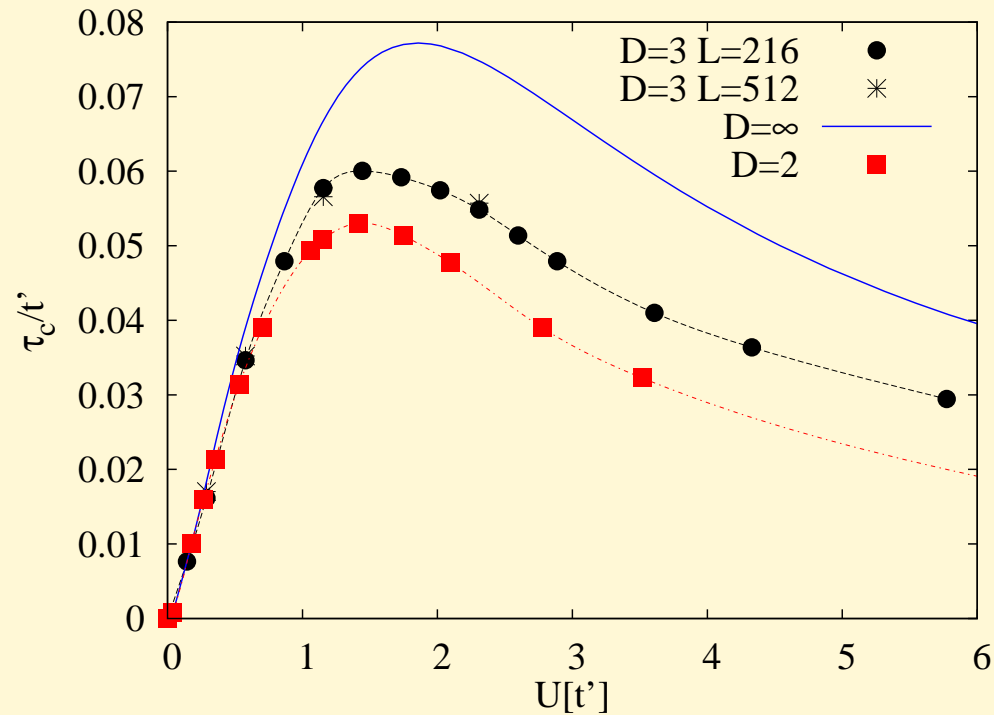
- $S_q^w(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2L} \sum_{j,k} e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} (w_j w_k)$
- Nízko teplotné maximum sa objavuje pri teplotách, kde sa štruktúrny faktor mení z 1 na  $\sim 0$ .
- Maximum je možné použiť na odhad kritickej teploty.

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK  
Metóda  
**Tepelná kapacita**  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium



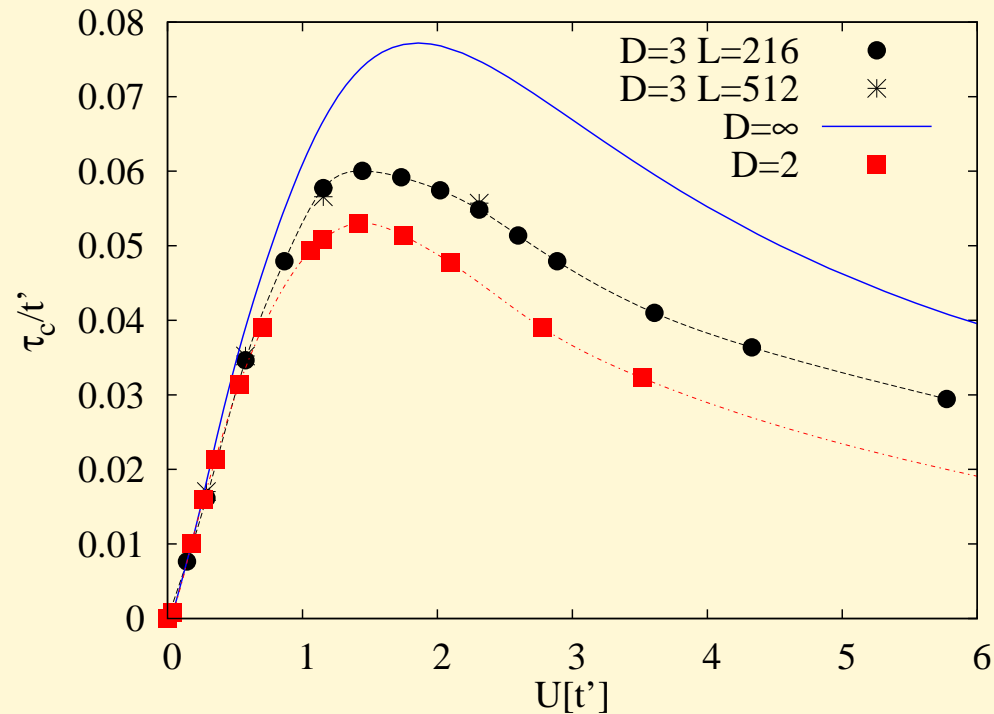


- Obsah
- Šilne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium



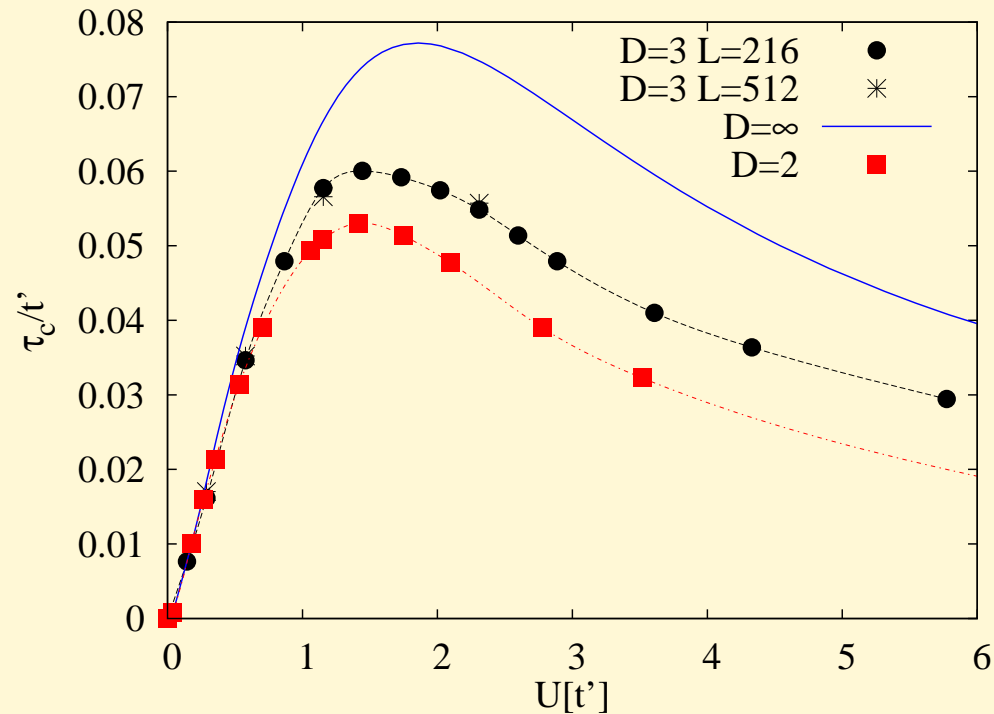
- Za účelom porovnania výsledkov pre rôzne dimezie boli použité iné jednotky:  $t' = 2t\sqrt{D}$

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium



- Za účelom porovnania výsledkov pre rôzne dimezie boli použité iné jednotky:  $t' = 2t\sqrt{D}$
- Kritické teploty v  $D = 3$  sú podstatne vyššie ako pre  $D = 2$  a nižšie ako pre  $D = \infty$ .

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium



- Za účelom porovnania výsledkov pre rôzne dimezie boli použité iné jednotky:  $t' = 2t\sqrt{D}$
- Kritické teploty v  $D = 3$  sú podstatne vyššie ako pre  $D = 2$  a nižšie ako pre  $D = \infty$ .
- Maximum pri ktorom dochádza k prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy sa posúva s dimenziou k vyšším hodnotám  $U$ .

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

- Akého druhu sú fázové prechody z usporiadanej do neusporiadanej fázy?

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

# Druh fázového prechodu

- Akého druhu sú fázové prechody z usporiadanej do neusporiadanej fázy?
- V limite silne coulombovskej interakcie je možné MFK previesť na antiferomagnetický Isingov model, teda v tejto limite ide o fázový prechod druhého druhu.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

# Druh fázového prechodu

- Akého druhu sú fázové prechody z usporiadanej do neusporiadanej fázy?
- V limite silne coulombovskej interakcie je možné MFK previesť na antiferomagnetický Isingov model, teda v tejto limite ide o fázový prechod druhého druhu.
- V  $D = 2$  bolo ukázané, že pre  $U \leq 1$  ide o fázový prechod prvého druhu.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

- Akého druhu sú fázové prechody z usporiadanej do neusporiadanej fázy?
- V limite silne coulombovskej interakcie je možné MFK previesť na antiferomagnetický Isingov model, teda v tejto limite ide o fázový prechod druhého druhu.
- V  $D = 2$  bolo ukázané, že pre  $U \leq 1$  ide o fázový prechod prvého druhu.
- Ako na to v  $D = 3$ ?

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium



- Akého druhu sú fázové prechody z usporiadanej do neusporiadanej fázy?
- V limite silne coulombovskej interakcie je možné MFK previesť na antiferomagnetický Isingov model, teda v tejto limite ide o fázový prechod druhého druhu.
- V  $D = 2$  bolo ukázané, že pre  $U \leq 1$  ide o fázový prechod prvého druhu.
- Ako na to v  $D = 3$ ?
  - ◆ Keďže pracujeme na konečných mriežkach, je ťažké rozlíšiť fázový prechod prvého a druhého druhu.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

- Akého druhu sú fázové prechody z usporiadanej do neusporiadanej fázy?
- V limite silne coulombovskej interakcie je možné MFK previesť na antiferomagnetický Isingov model, teda v tejto limite ide o fázový prechod druhého druhu.
- V  $D = 2$  bolo ukázané, že pre  $U \leq 1$  ide o fázový prechod prvého druhu.
- Ako na to v  $D = 3$ ?
  - ◆ Keďže pracujeme na konečných mriežkach, je ťažké rozlíšiť fázový prechod prvého a druhého druhu.
  - ◆ Použili sme metódu, ktorú vypracovali Challa a kol..:

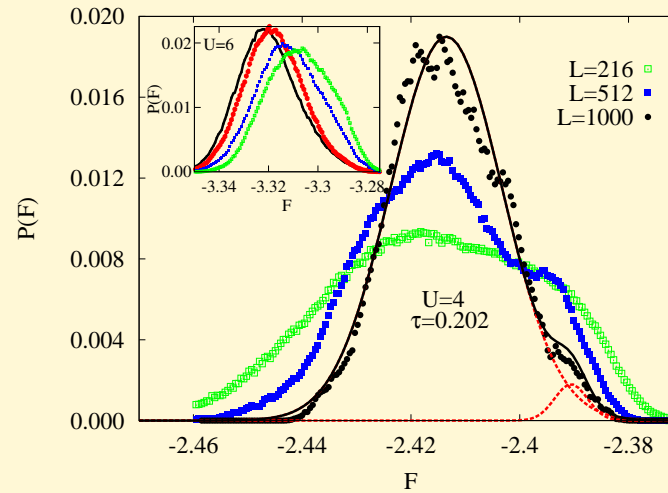
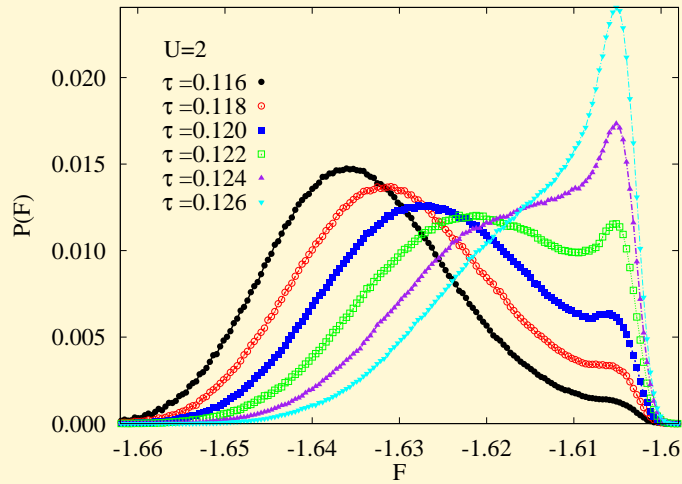
- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

# Druh fázového prechodu

- Akého druhu sú fázové prechody z usporiadanej do neusporiadanej fázy?
- V limite silne coulombovskej interakcie je možné MFK previesť na antiferomagnetický Isingov model, teda v tejto limite ide o fázový prechod druhého druhu.
- V  $D = 2$  bolo ukázané, že pre  $U \leq 1$  ide o fázový prechod prvého druhu.
- Ako na to v  $D = 3$ ?
  - ◆ Keďže pracujeme na konečných mriežkach, je ťažké rozlíšiť fázový prechod prvého a druhého druhu.
  - ◆ Použili sme metódu, ktorú vypracovali Challa a kol...: Distribúciu  $F$  možno popísať na okolí fázového prechodu prvého druhu ako súčet dvoch gaussiánov s rozdielnymi parametrami. (Dvojmaximová štruktúra)

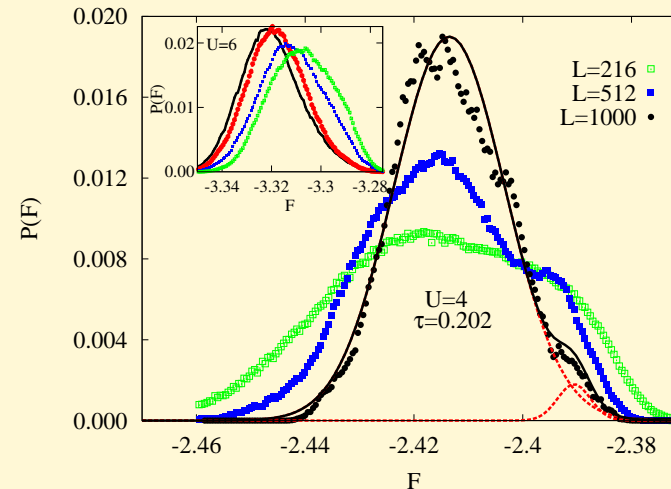
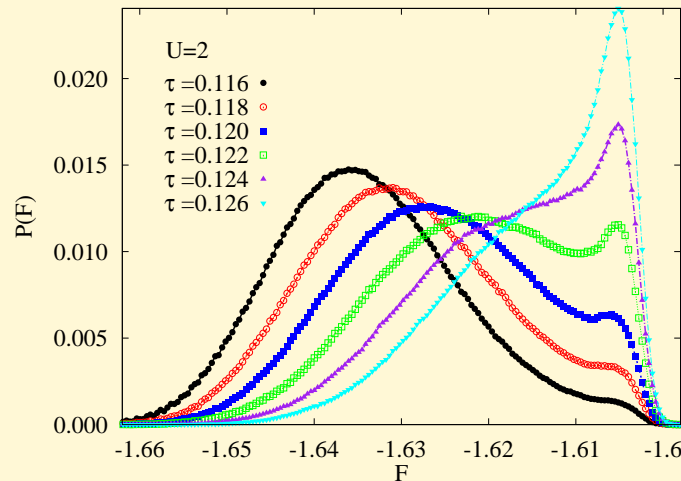
- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty**
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

# Distribúcia elektrónovej voľnej energia



- Obsah
- Šilne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$**
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

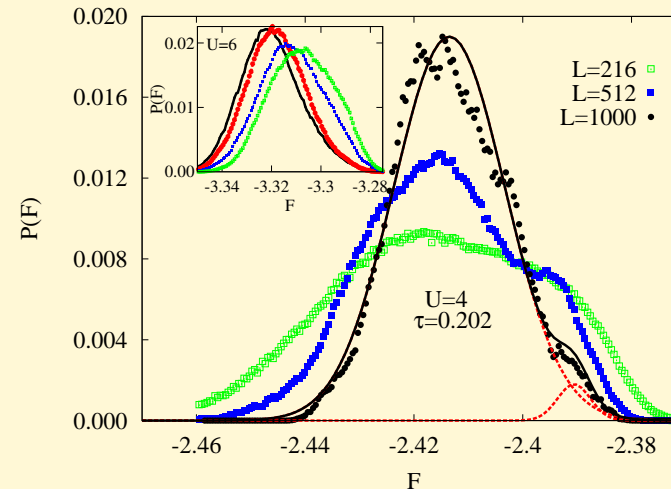
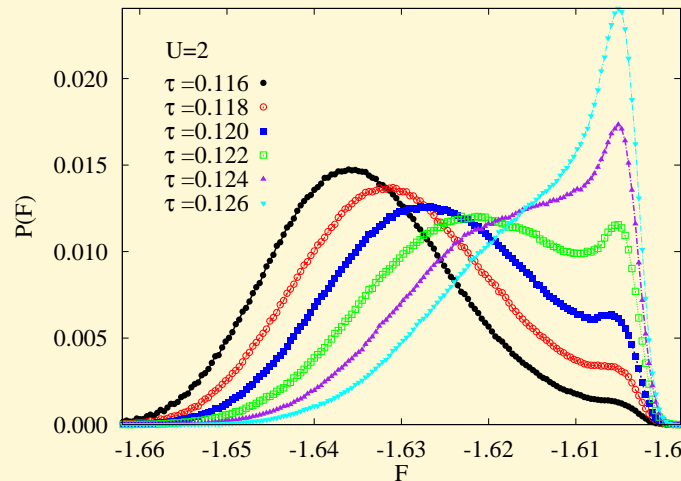
# Distribúcia elektrónovej voľnej energia



- Distribúcia  $F$  pre  $U = 2$  pozostáva z dvoch gaussiánov, ktoré sú centrované na rozdielne hodnoty  $F$ . Ide o fázový prechod prvého druhu.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$**
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

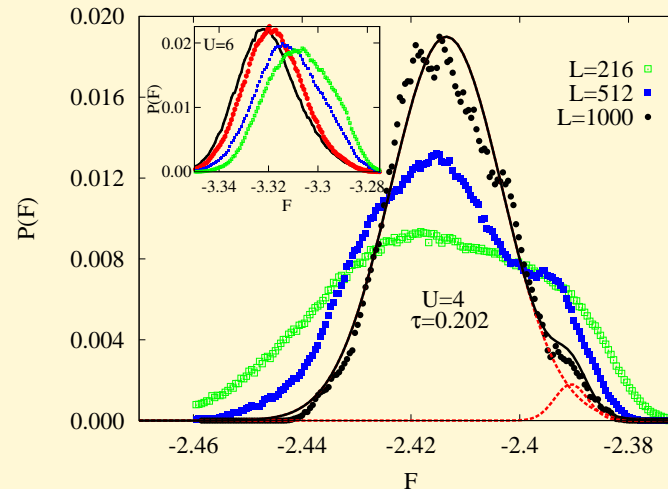
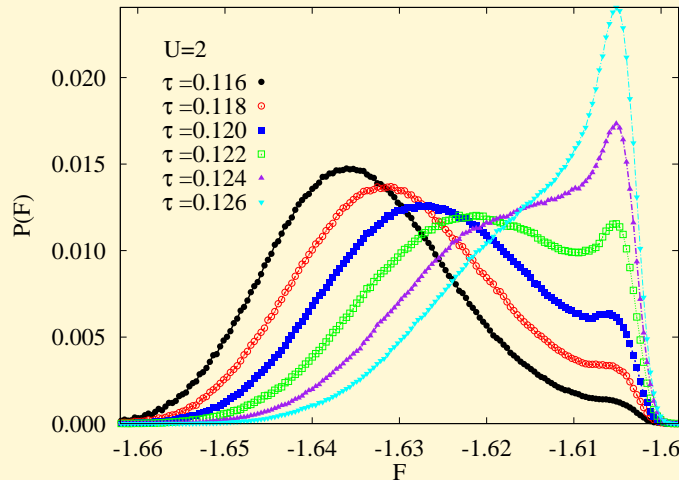
# Distribúcia elektrónovej voľnej energia



- Distribúcia  $F$  pre  $U = 2$  pozostáva z dvoch gaussiánov, ktoré sú centrované na rozdielne hodnoty  $F$ . Ide o fázový prechod prvého druhu.
- Dve maximá sa objavujú až do  $U = 4$ , čo je prekvapivo vysoká hodnota! Treba byť opatrný pri robení konečných záverov.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$**
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

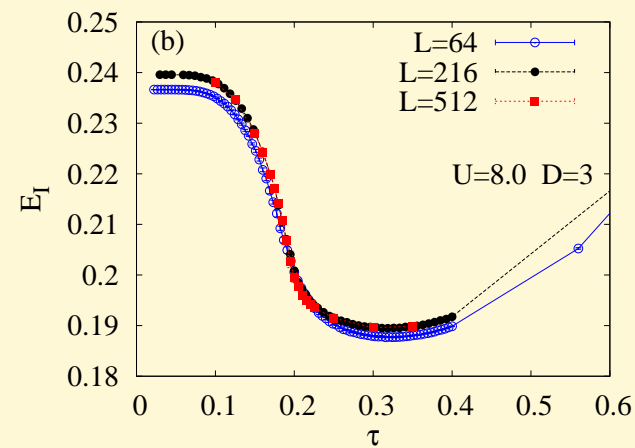
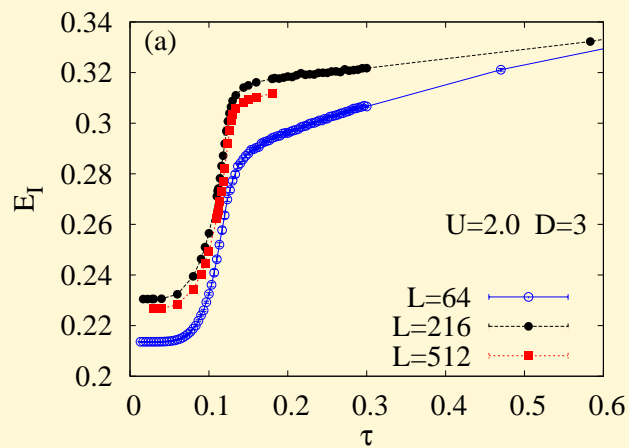
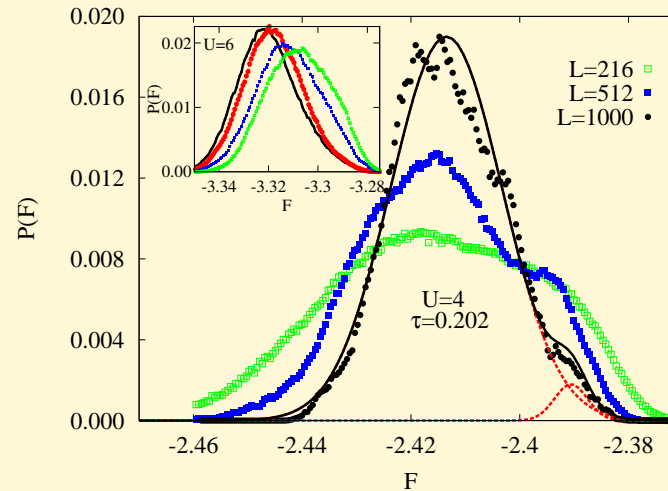
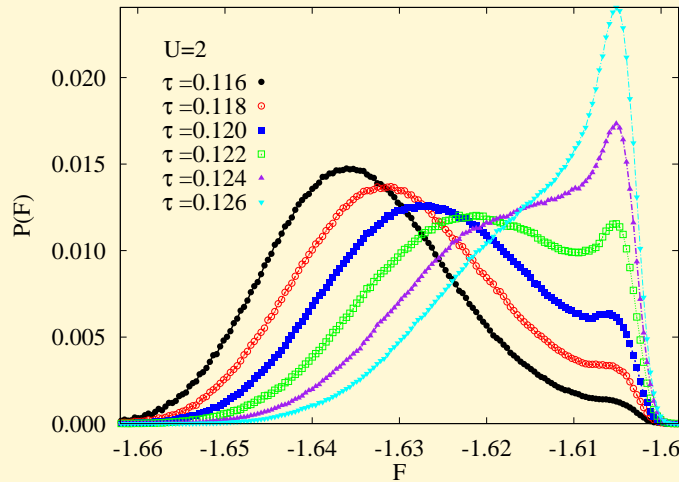
# Distribúcia elektrónovej voľnej energia



- Distribúcia  $F$  pre  $U = 2$  pozostáva z dvoch gaussiánov, ktoré sú centrované na rozdielne hodnoty  $F$ . Ide o fázový prechod prvého druhu.
- Dve maximá sa objavujú až do  $U = 4$ , čo je prekvapivo vysoká hodnota! Treba byť opatrný pri robení konečných záverov.
- Pre  $U = 6$  jednoduchá jednomaximová distribúcia  $F$  potvrdzuje fázový prechod druhého druhu.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$**
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

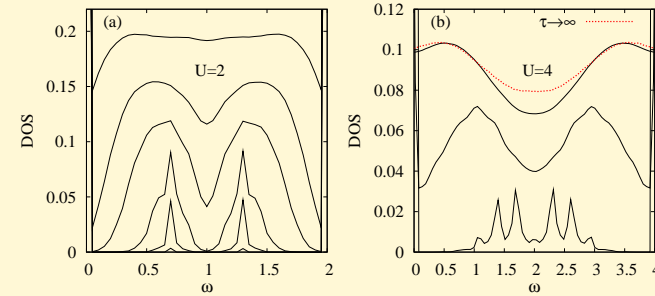
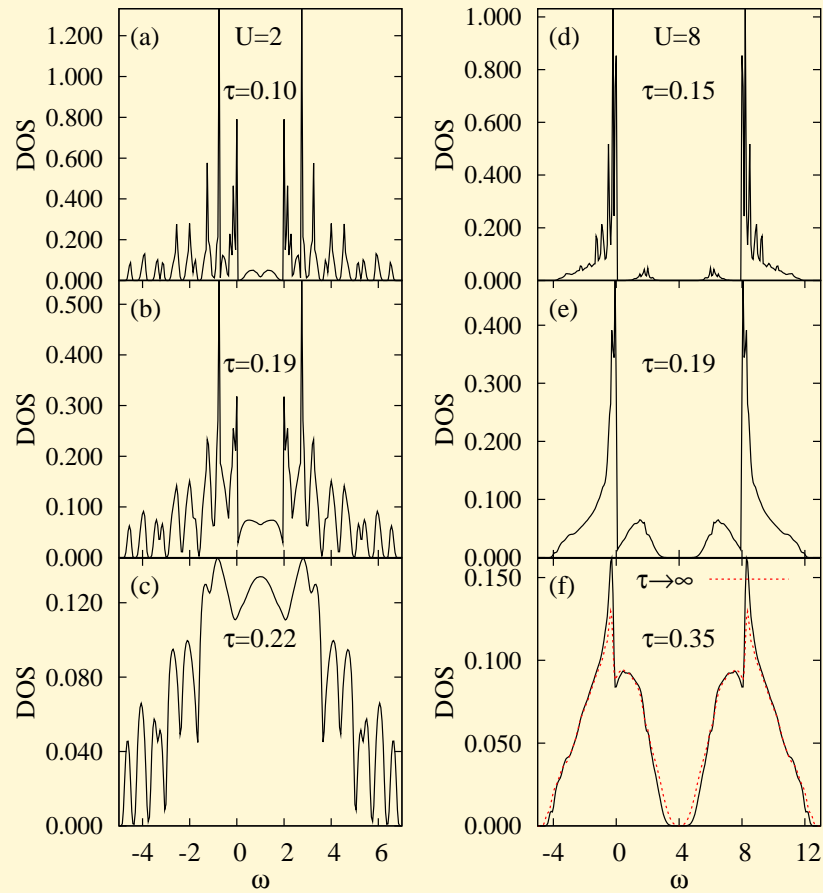
# Distribúcia elektrónovej voľnej energia



- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$**
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

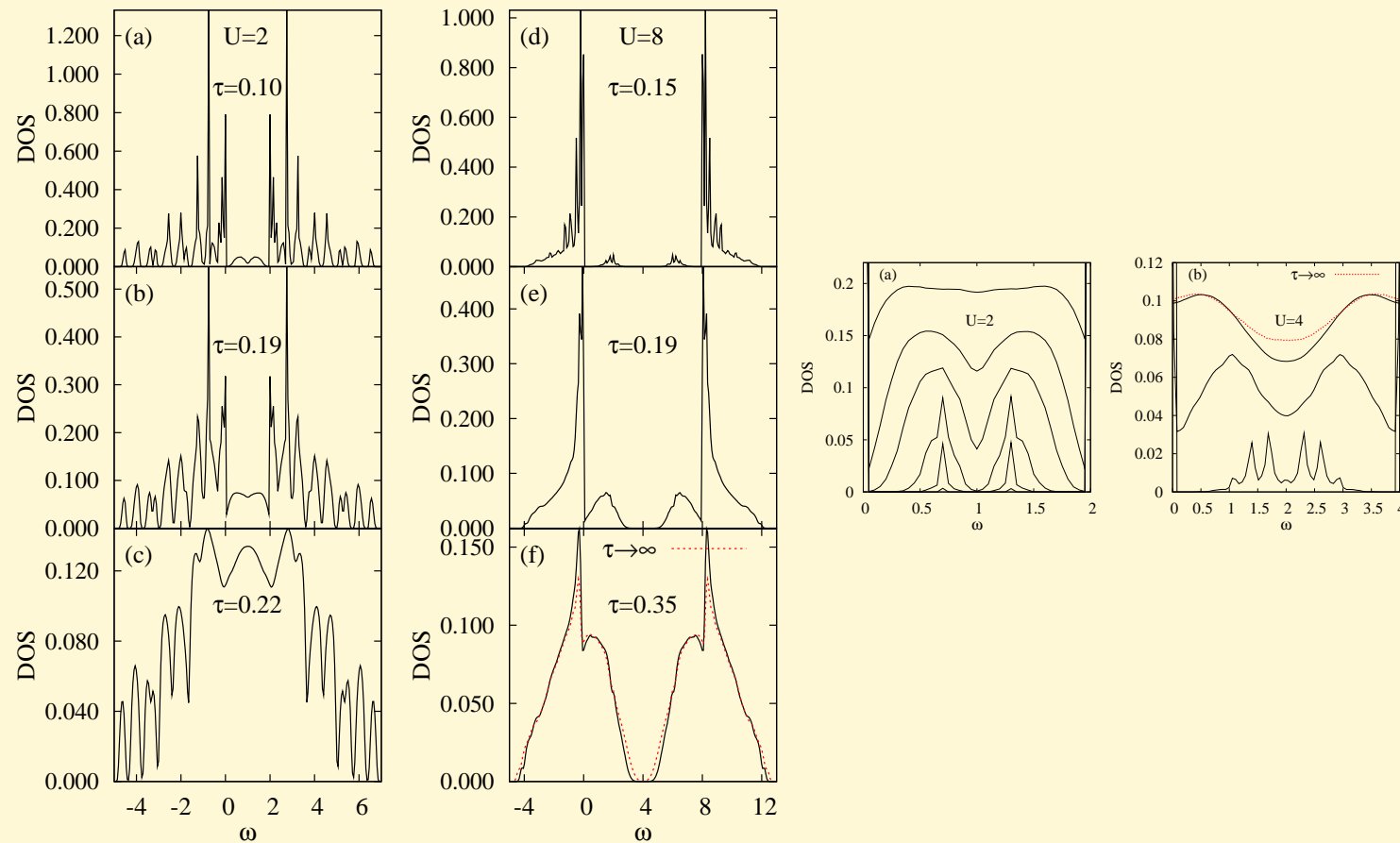


# Hustota $d$ -elektrónových stavov (DOS)



- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS**
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

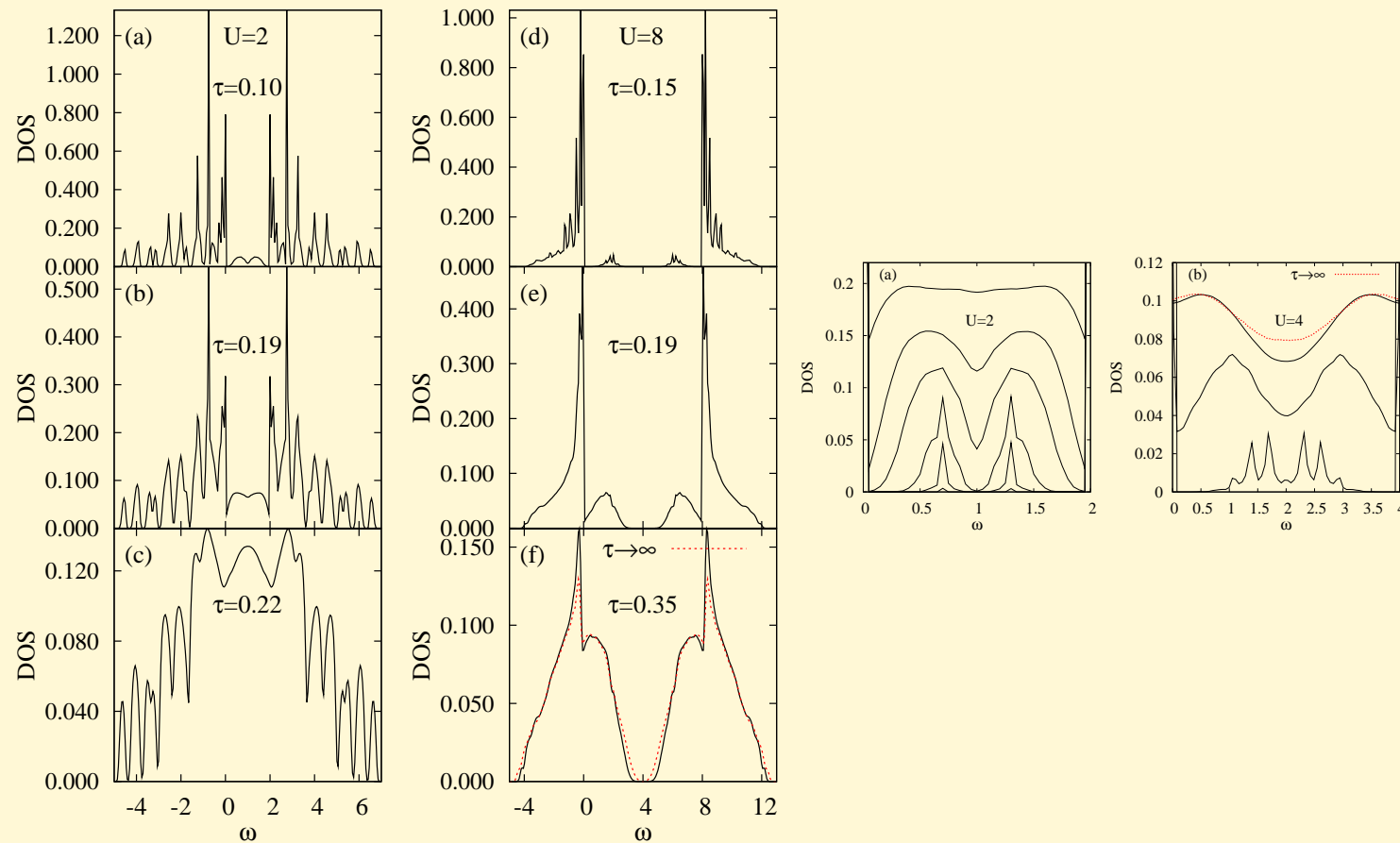
# Hustota $d$ -elektrónových stavov (DOS)



- S narastajúcou teplotou sa v DOS v oblasti  $0 < \omega < U$  objavuje jemná štruktúra (JŠ).

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS**
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

# Hustota $d$ -elektrónových stavov (DOS)



- S narastajúcou teplotou sa v DOS v oblasti  $0 < \omega < U$  objavuje jemná štruktúra (JŠ).
- JŠ prechádza pre malé a stredné hodnoty  $U$  do pseudo medzery. (Prechod kov-izolátor)

Obsah

Silne korelované elektrónové systémy

MFK

Metóda

Tepelná kapacita

Kritické teploty

Distribúcia  $F$

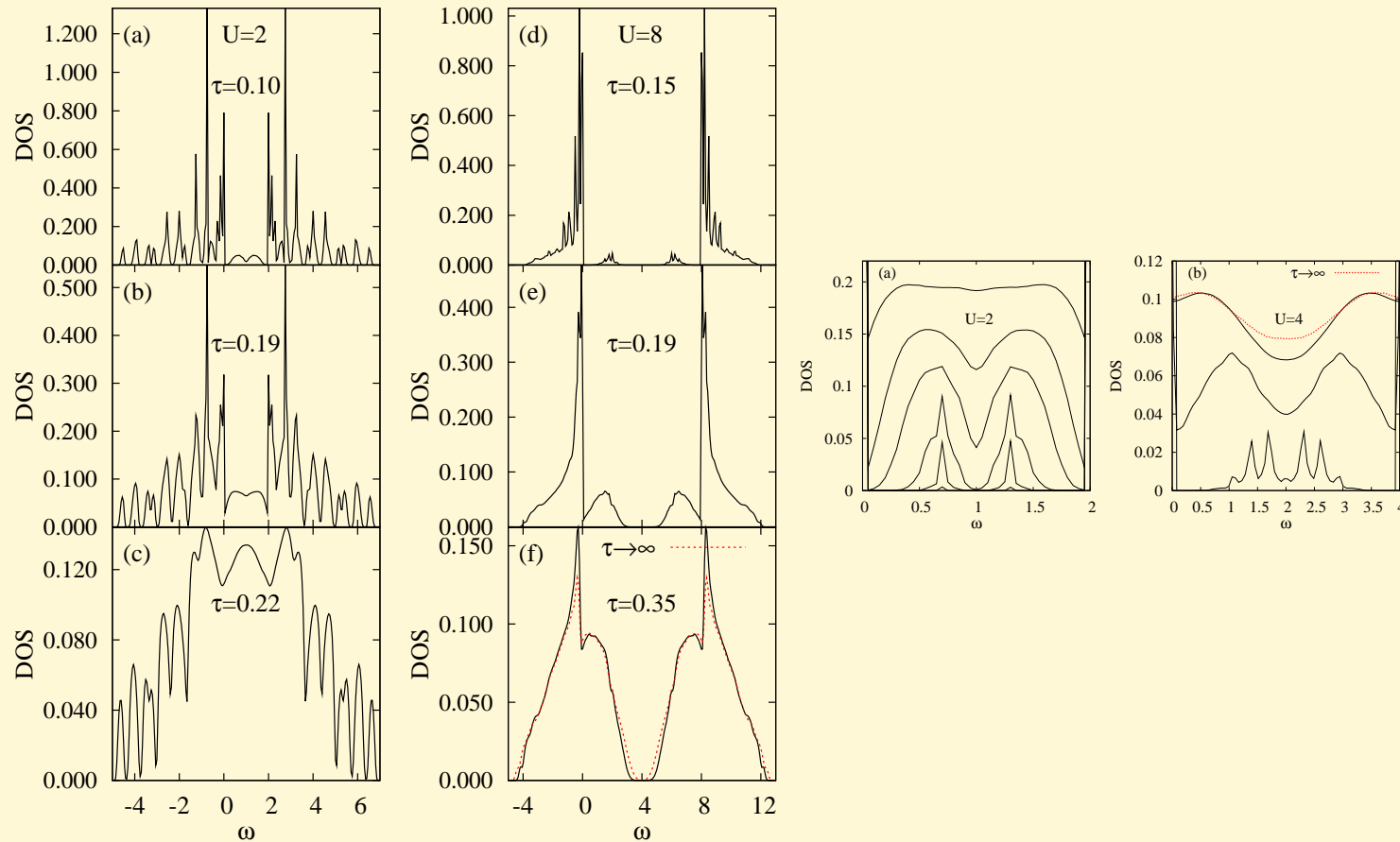
**DOS**

Homogénna fáza

Záver

Doktorandské štúdium

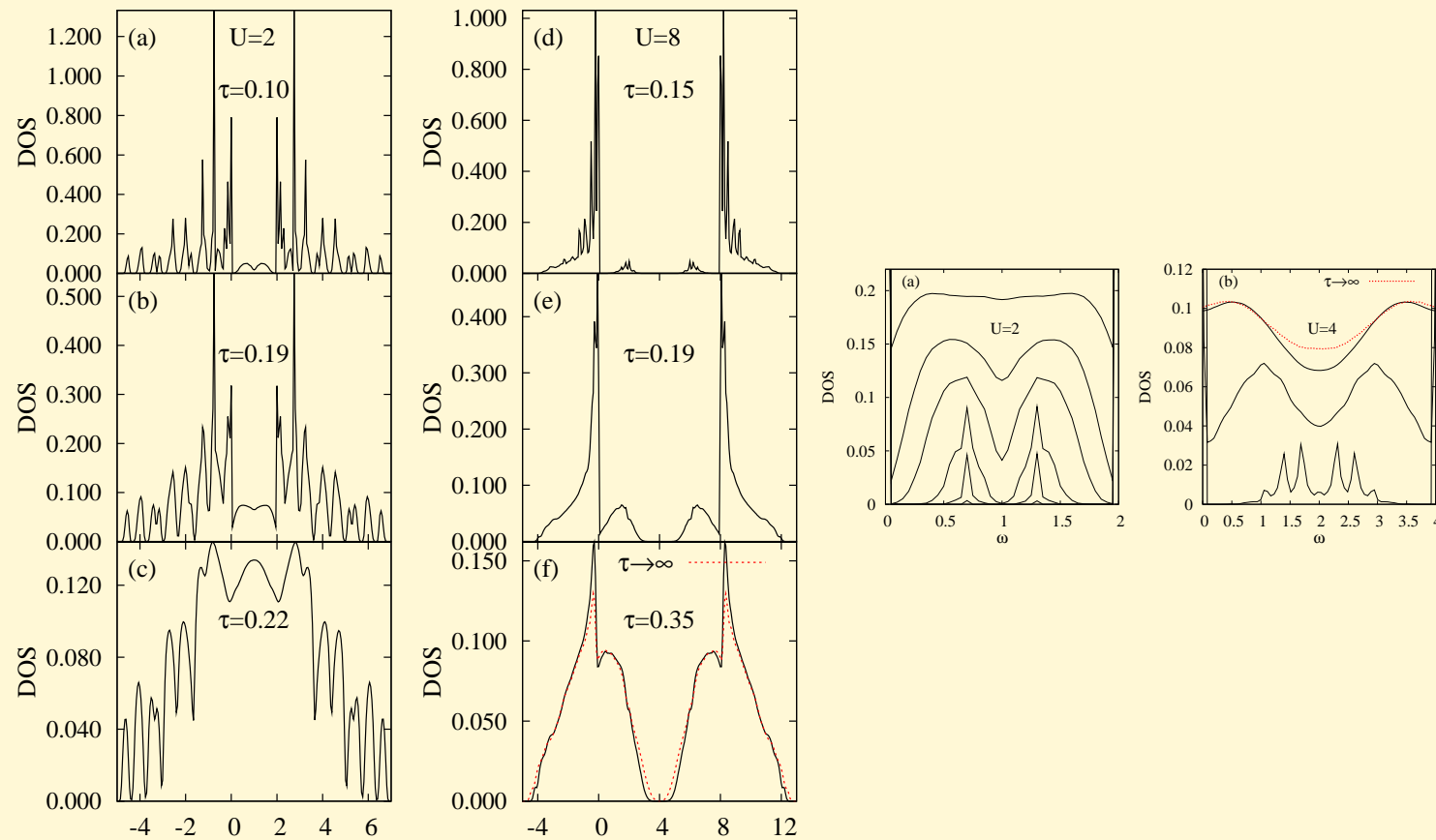
# Hustota $d$ -elektrónových stavov (DOS)



- S narastajúcou teplotou sa v DOS v oblasti  $0 < \omega < U$  objavuje jemná štruktúra (JŠ).
- JŠ prechádza pre malé a stredné hodnoty  $U$  do pseudo medzery. (Prechod kov-izolátor)
- V limite silnej interakcie JŠ znižuje šírku energetickej medzery.

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK  
Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
**DOS**  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

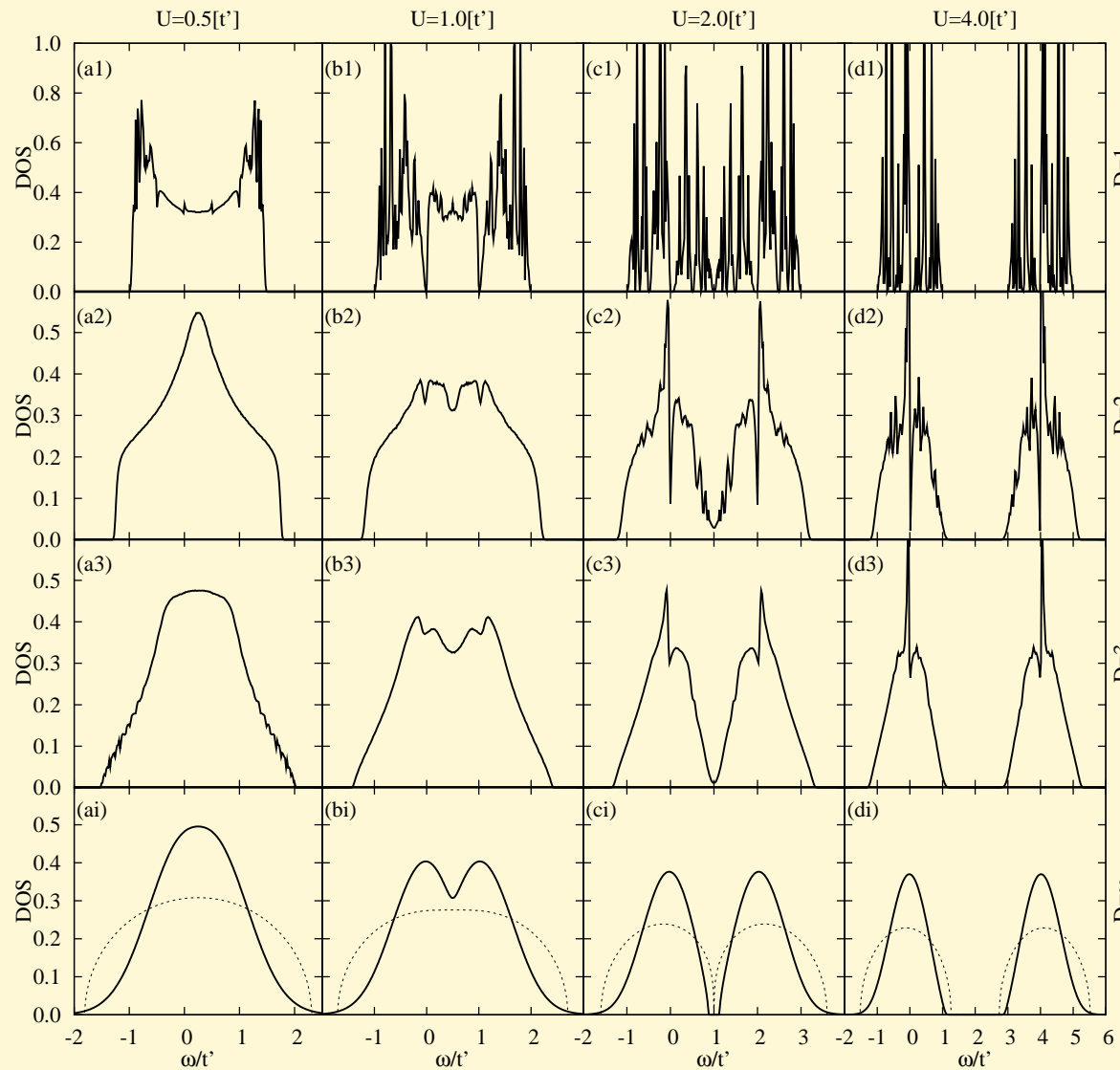
# Hustota $d$ -elektrónových stavov (DOS)



- Prieběh DOS, pre teploty len o málo vyššie ako kritická teplota, prakticky nezávisí od teploty. Preto DOS v neusporiadanej fáze je možné študovať v limite  $\tau \rightarrow \infty$ , kde vieme dosiahnuť podstatne väčšie mriežky.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS**
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium

# DOS v neusporiadanej fáze



- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza**
- Záver
- Doktorandské štúdium

- Použili sme klasické Monte-Carlo na štúdium rôznych fázových prechodov v MFK v  $D = 3$

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**
- Doktorandské štúdium

- Použili sme klasické Monte-Carlo na štúdium rôznych fázových prechodov v MFK v  $D = 3$
- Na základe maximálnych merných teplôt sme skonštruovali fázový diagram v rovine  $(U-\tau)$ , kde sme ukázali, že kritické teploty prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy sú podstatne vyššie ako v  $D = 2$  a podstatne nižšie ako v  $D = \infty$

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**
- Doktorandské štúdium



- Použili sme klasické Monte-Carlo na štúdium rôznych fázových prechodov v MFK v  $D = 3$
- Na základe maximálného merného tepla sme skonštruovali fázový diagram v rovine  $(U-\tau)$ , kde sme ukázali, že kritické teploty prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy sú podstatne vyššie ako v  $D = 2$  a podstatne nižšie ako v  $D = \infty$
- V závislosti od  $U$  ide o fázový prechod prvého alebo druhého druhu. Pritom výsledky naznačujú, že prechod prvého druhu môže byť až do hodnôt  $U \sim 4$ , čo je významný nárast v porovnaní s  $D = 2$ .

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**
- Doktorandské štúdium

- Použili sme klasické Monte-Carlo na štúdium rôznych fázových prechodov v MFK v  $D = 3$
- Na základe maximálného merného tepla sme skonštruovali fázový diagram v rovine  $(U-\tau)$ , kde sme ukázali, že kritické teploty prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy sú podstatne vyššie ako v  $D = 2$  a podstatne nižšie ako v  $D = \infty$
- V závislosti od  $U$  ide o fázový prechod prvého alebo druhého druhu. Pritom výsledky naznačujú, že prechod prvého druhu môže byť až do hodnôt  $U \sim 4$ , čo je významný nárast v porovnaní s  $D = 2$ .
- Popísali sme na teplote závislú jemnú štruktúru DOS a prechod kov-izolátor indukovaný teplotou.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**
- Doktorandské štúdium

- Použili sme klasické Monte-Carlo na štúdium rôznych fázových prechodov v MFK v  $D = 3$
- Na základe maxim merného tepla sme skonštruovali fázový diagram v rovine  $(U-\tau)$ , kde sme ukázali, že kritické teploty prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy sú podstatne vyššie ako v  $D = 2$  a podstatne nižšie ako v  $D = \infty$
- V závislosti od  $U$  ide o fázový prechod prvého alebo druhého druhu. Pritom výsledky naznačujú, že prechod prvého druhu môže byť až do hodnôt  $U \sim 4$ , čo je významný nárast v porovnaní s  $D = 2$ .
- Popísali sme na teplote závislú jemnú štruktúru DOS a prechod kov-izolátor indukovaný teplotou.
- V homogénnej fáze sme popísali Mottov-Hubbardov prechod pri konečných teplotách a diskutovali sme rozdiely v DOS pre rôzne dimenzie.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**
- Doktorandské štúdium

- Použili sme klasické Monte-Carlo na štúdium rôznych fázových prechodov v MFK v  $D = 3$
- Na základe maxim merného tepla sme skonštruovali fázový diagram v rovine  $(U-\tau)$ , kde sme ukázali, že kritické teploty prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy sú podstatne vyššie ako v  $D = 2$  a podstatne nižšie ako v  $D = \infty$
- V závislosti od  $U$  ide o fázový prechod prvého alebo druhého druhu. Pritom výsledky naznačujú, že prechod prvého druhu môže byť až do hodnôt  $U \sim 4$ , čo je významný nárast v porovnaní s  $D = 2$ .
- Popísali sme na teplote závislú jemnú štruktúru DOS a prechod kov-izolátor indukovaný teplotou.
- V homogénnej fáze sme popísali Mottov-Hubbardov prechod pri konečných teplotách a diskutovali sme rozdiely v DOS pre rôzne dimenzie.
- Časť práce bude prezentovaná na konferencii ICM v Karlsruhe, článok sa dokončuje a bude zaslaný do Solid State Communications.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**
- Doktorandské štúdium

# Stav môjho doktorandského štúdia na konci tretieho ročníka

- V júli 2008 som úspešne absolvoval “minimovú skúšku” a obhájil minimovú prácu (RNDr.)

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium**

# Stav môjho doktorandského štúdia na konci tretieho ročníka

- V júli 2008 som úspešne absolvoval “minimovú skúšku” a obhájl minimovú prácu (RNDr.)
- Som spoluautorom desiatich článkov (piatich ako prvý autor), ktoré už vyšli v karentovaných časopisoch.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metóda
- Tepelná kapacita
- Kritické teploty
- Distribúcia  $F$
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver
- Doktorandské štúdium**

# Stav môjho doktorandského štúdia na konci tretieho ročníka

- V júli 2008 som úspešne absolvoval “minimovú skúšku” a obhájil minimovú prácu (RNDr.)
- Som spoluautorom desiatich článkov (piatich ako prvý autor), ktoré už vyšli v karentovaných časopisoch.
- Doterajšiu prácu som prezentoval na dvoch zahraničných a jednej domácej konferencii s medzinárodnou účasťou, na ústavnom seminári kondenzovaných látok a súťaži mladých vedcov ÚEF.

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK  
Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium

Ďakujem za pozornosť

Obsah  
Silne korelované  
elektrónové systémy  
MFK  
Metóda  
Tepelná kapacita  
Kritické teploty  
Distribúcia  $F$   
DOS  
Homogénna fáza  
Záver  
Doktorandské  
štúdium