

Teoretické štúdium fázových prechodov v silne korelovaných elektrónových systémoch, trojrozmerný model Falicova-Kimballa

Martin Žonda, P. Farkašovský, H. Čenčariková

29. septembra 2009

■ Motivácia

Obsah

Silne korelované
elektrónové systémy

MFK

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

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

Obsah

- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

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

Obsah

Silne korelované
elektrónové systémy
MFK
Metódy
Metódy ZS
Metódy Term.
Tepelná kapacita
Susceptibilita
Kritické teploty
Distribúcia F
DOS
Homogénna fáza
Záver

- Motivácia
 - ◆ Silne korelované elektrónové systémy (SKES)
 - ◆ Model Falicova-Kimballa (MFK) - úvod
- Metódy
 - ◆ Základný stav
 - ◆ Termodynamika

Obsah

Silne korelované
elektrónové systémy
MFK
Metódy
Metódy ZS
Metódy Term.
Tepelná kapacita
Susceptibilita
Kritické teploty
Distribúcia F
DOS
Homogénna fáza
Záver

- Motivácia
 - ◆ Silne korelované elektrónové systémy (SKES)
 - ◆ Model Falicova-Kimballa (MFK) - úvod
- Metódy
 - ◆ Základný stav
 - ◆ Termodynamika
- Fázové prechody v 3D MFK

Obsah

Silne korelované elektrónové systémy
MFK
Metódy
Metódy ZS
Metódy Term.
Tepelná kapacita
Susceptibilita
Kritické teploty
Distribúcia F
DOS
Homogénna fáza
Záver

- Motivácia
 - ◆ Silne korelované elektrónové systémy (SKES)
 - ◆ Model Falicova-Kimballa (MFK) - úvod
- Metódy
 - ◆ Základný stav
 - ◆ Termodynamika
- Fázové prechody v 3D MFK
- Záver

Obsah

Silne korelované elektrónové systémy
MFK
Metódy
Metódy ZS
Metódy Term.
Tepelná kapacita
Susceptibilita
Kritické teploty
Distribúcia F
DOS
Homogénna fáza
Záver

Silne korelované elektrónové systémy

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

Obsah

Silne korelované elektrónové systémy

MFK

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

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

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

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

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

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

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

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.
- Niektoré jednoduché modely: Hubbardov model, t-J model, Andersonov model ...

Obsah

Silne korelované elektrónové systémy

MFK

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

Model Falicova-Kimballa

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

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

Obsah
Silne korelované
elektrónové systémy

MFK

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

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

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

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

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

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

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

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

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

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

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

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

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

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

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 MFK v jednotlivých dimenziách?

Obsah
Silne korelované
elektrónové systémy

MFK

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

- Platí $[f_i^+ f_i, H] = 0$ a teda operátor $f_i^+ f_i$ je možné nahradit' jeho vlastnými hodnotami w_i .

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

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy**
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

- Platí $[f_i^+ f_i, H] = 0$ a teda operátor $f_i^+ f_i$ je možné nahradiť jeho vlastnými hodnotami w_i .

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

$$h_{ij}(w) = t_{ij} + U w_i \delta_{ij}.$$

- Pre zvolenú konfiguráciu w , metódou kanonických transformácií prevedieme problém na jednočasticový. To znamená zdiagonalizovať maticu h a nájsť vlastným hodnotám (ε_i) prisluchajúce vlastné vektory. Vlastné vektory tvoria unitárnu maticu \mathcal{U} :

$$\tilde{d}_i = \sum_{\alpha} \mathcal{U}_{\alpha i} d_{\alpha}$$

$$\tilde{d}_i^+ = \sum_{\alpha} \mathcal{U}_{\alpha i} d_{\alpha}^+$$

Obsah
Silne korelované
elektrónové systémy

MFK

Metódy

Metódy ZS

Metódy Term.

Tepelná kapacita

Susceptibilita

Kritické teploty

Distribúcia F

DOS

Homogénna fáza

Záver

- Platí $[f_i^+ f_i, H] = 0$ a teda operátor $f_i^+ f_i$ je možné nahradiť jeho vlastnými hodnotami w_i .

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

$$h_{ij}(w) = t_{ij} + U w_i \delta_{ij}.$$

- Pre zvolenú konfiguráciu w , metódou kanonických transformácií prevedieme problém na jednočasticový. To znamená zdiagonalizovať maticu h a nájsť vlastným hodnotám (ε_i) prisluchajúce vlastné vektory. Vlastné vektory tvoria unitárnu maticu \mathcal{U} :

$$\tilde{d}_i = \sum_{\alpha} \mathcal{U}_{\alpha i} d_{\alpha}$$

$$\tilde{d}_i^+ = \sum_{\alpha} \mathcal{U}_{\alpha i} d_{\alpha}^+$$

- Základné korelačné funkcie pre itinerantný podsystem je možné vyjadriť pomocou vlastných vektorov, napr.:

$$\langle d_i^+ d_j \rangle_w = \sum_{\alpha \leq \alpha_F} \mathcal{U}_{i\alpha}^+ \mathcal{U}_{\alpha j}$$

$$\langle n_i^d n_j^d \rangle_w = \sum_{\alpha \leq \alpha_F} \mathcal{U}_{i\alpha}^+ \mathcal{U}_{\alpha i} \sum_{\alpha' \leq \alpha_F} \mathcal{U}_{j\alpha'}^+ \mathcal{U}_{\alpha' j} - \left| \sum_{\alpha \leq \alpha_F} \mathcal{U}_{i\alpha}^+ \mathcal{U}_{\alpha j} \right|^2.$$

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy**
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

- Najst' základný stav znamená najst' f -elektrónovú konfiguráciu ktorej prislúcha najmenšia energia.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS**
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[1] P. Farkašovský, Eur. J. Phys. B **20**, 290 (2001)

[2] G.I. Watson, R. Lemanski, J. Phys.: Condens. Matter **7**, 9521 (1995)

- Najst' základný stav znamená najst' f -elektrónovú konfiguráciu ktorej prislúcha najmenšia energia.
- ◆ Exaktne: Vyskúšať všetky konfigurácie (2^L). Ich počet je možné výrazne zredukovať využitím symetrií hamiltoniánu a samotnej mriežky.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS**
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[1] P. Farkašovský, Eur. J. Phys. B **20**, 290 (2001)

[2] G.I. Watson, R. Lemanski, J. Phys.: Condens. Matter **7**, 9521 (1995)

- Nájst' základný stav znamená nájst' f -elektrónovú konfiguráciu ktorej prislúcha najmenšia energia.
 - ◆ Exaktne: Vyskúšať všetky konfigurácie (2^L). Ich počet je možné výrazne zredukovať využitím symetrií hamiltoniánu a samotnej mriežky.
 - ◆ Použitím rôznych optimalizačných metód: Simulované žíhanie, rôzne horolezecké algoritmy ... Najefektívnejšou sa ukázala byť gradientna metóda rozpracovaná Farkašovským^[1].

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS**
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[1] P. Farkašovský, Eur. J. Phys. B **20**, 290 (2001)

[2] G.I. Watson, R. Lemanski, J. Phys.: Condens. Matter **7**, 9521 (1995)

- Nájst' základný stav znamená nájsť f -elektrónovú konfiguráciu ktorej prislúcha najmenšia energia.
 - ◆ Exaktne: Vyskúšať všetky konfigurácie (2^L). Ich počet je možné výrazne zredukovať využitím symetrií hamiltoniánu a samotnej mriežky.
 - ◆ Použitím rôznych optimalizačných metód: Simulované žihanie, rôzne horolezecké algoritmy ... Najefektívnejšou sa ukázala byť gradientna metóda rozpracovaná Farkašovským^[1].
 - ◆ Iné aproximatívne metódy: Napríklad metóda RPDM^[2] (restricted phase diagram method).

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS**
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[1] P. Farkašovský, Eur. J. Phys. B **20**, 290 (2001)

[2] G.I. Watson, R. Lemanski, J. Phys.: Condens. Matter **7**, 9521 (1995)

- Štatistická suma sa dá vyjadriť ako:

$$\Xi = \sum_{\{w\}} e^{-\beta[(E_f - \mu)N_f]} \prod_i (1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$$

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.**
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

- Štatistická suma sa dá vyjadriť ako:

$$\Xi = \sum_{\{w\}} e^{-\beta[(E_f - \mu)N_f]} \prod_i (1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$$

- Takýto zápis umožňuje použiť klasické Monte-Carlo (MC).

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.**
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

- Štatistická suma sa dá vyjadriť ako:

$$\Xi = \sum_{\{w\}} e^{-\beta[(E_f - \mu)N_f]} \prod_i (1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$$

- Takýto zápis umožňuje použiť klasické Monte-Carlo (MC).
- 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
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.**
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

- Štatistická suma sa dá vyjadriť ako:

$$\Xi = \sum_{\{w\}} e^{-\beta[(E_f - \mu)N_f]} \prod_i (1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$$

- Takýto zápis umožňuje použiť klasické Monte-Carlo (MC).

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

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

- Ako počítat' stredné hodnoty?

$$C_{V,N} = \left(\frac{\partial (E - \mu N)}{\partial T} \right)_{V,\mu} - T \frac{\left(\frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\mu}^2}{\left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T}}$$

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.**
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

- Štatistická suma sa dá vyjadriť ako:

$$\Xi = \sum_{\{w\}} e^{-\beta[(E_f - \mu)N_f]} \prod_i (1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$$

- Takýto zápis umožňuje použiť klasické Monte-Carlo (MC).

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

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

- Ako počítat' stredné hodnoty?

$$C_{V,N} = \left(\frac{\partial (E - \mu N)}{\partial T} \right)_{V,\mu} - T \frac{\left(\frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\mu}^2}{\left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T}}$$

- Ide o grand-kanonický súbor! Zásadnou komplikáciou je potreba stanoviť chemický potenciál pre každú teplotu.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.**
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

- Štatistická suma sa dá vyjadriť ako:

$$\Xi = \sum_{\{w\}} e^{-\beta[(E_f - \mu)N_f]} \prod_i (1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$$

- Takýto zápis umožňuje použiť klasické Monte-Carlo (MC).

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

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

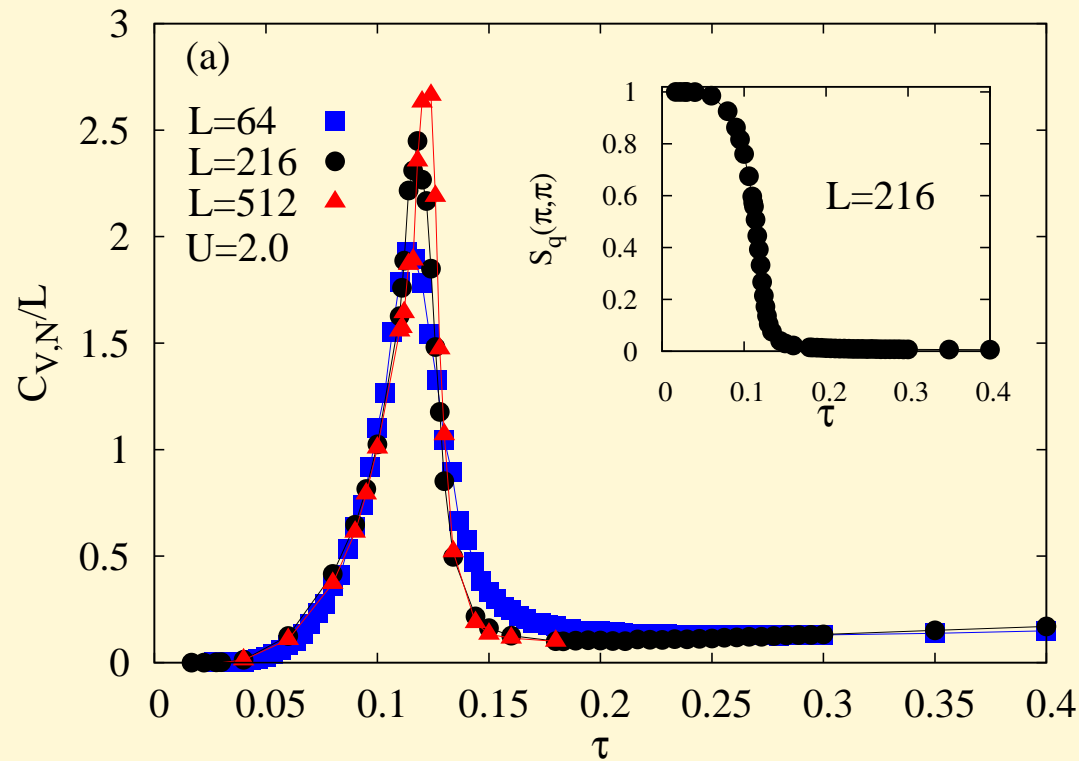
- Ako počítat' stredné hodnoty?

$$C_{V,N} = \left(\frac{\partial (E - \mu N)}{\partial T} \right)_{V,\mu} - T \frac{\left(\frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\mu}^2}{\left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T}}$$

- Ide o grand-kanonický súbor! Zásadnou komplikáciou je potreba stanoviť chemický potenciál pre každú teplotu.

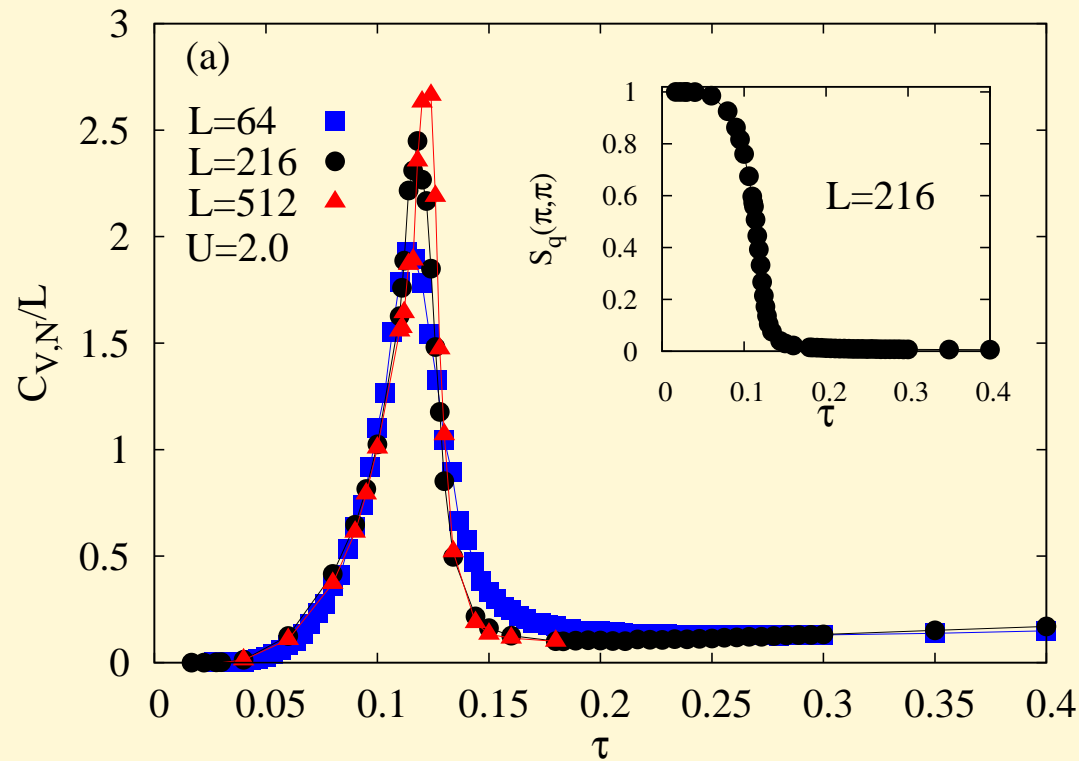
- Ďalej sa budem venovať termodynamike MFK v 3D a v symetrickom prípade ($\mu = U/2$, $E_f = 0$), kde základným stavom je šachovnicové usporiadanie lokalizovaných častíc.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.**
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver



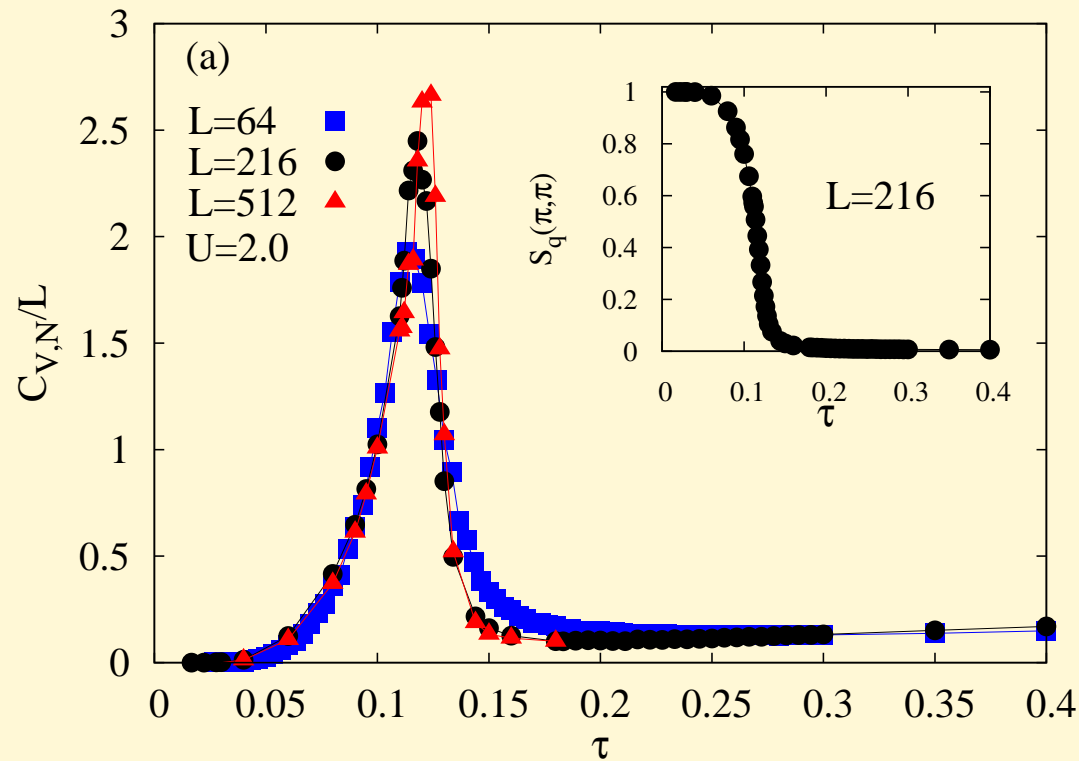
■
$$S_q^w(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2L} \sum_{j,k} e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} (w_j w_k)$$

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita**
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver



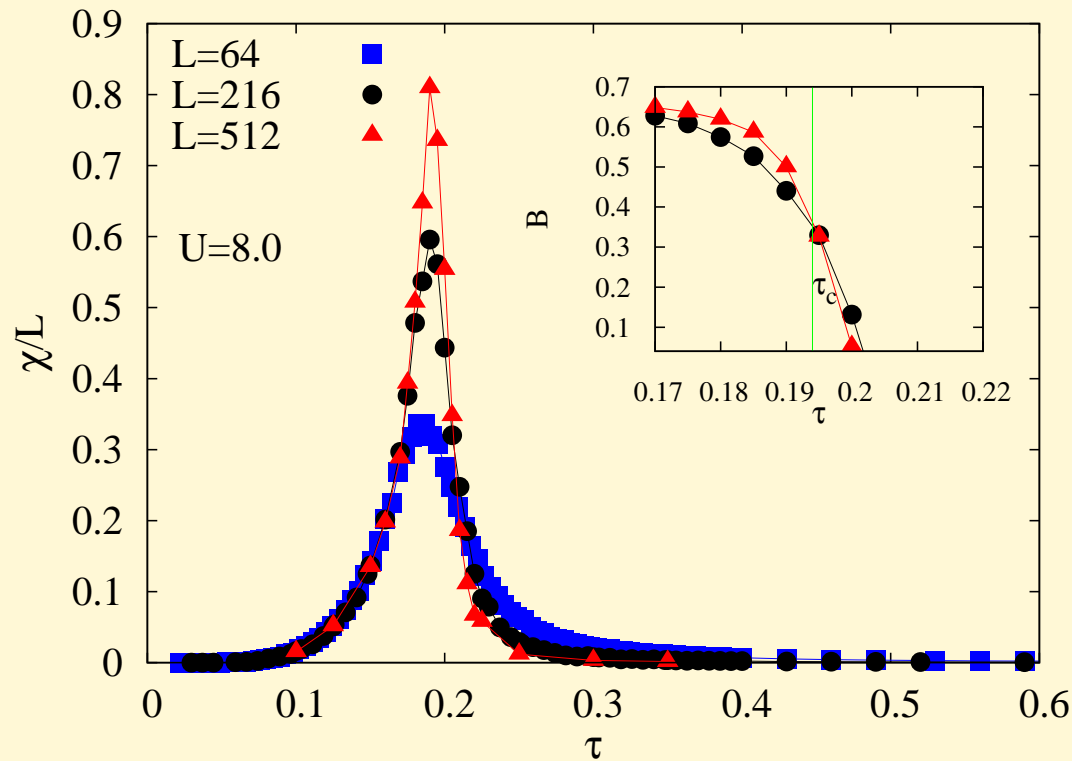
- $S_q^w(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2L} \sum_{j,k} e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} (w_j w_k)$
- Nízko teplotné maximum sa objavuje pri teplotách, kde sa štruktúrny faktor mení z 1 na ~ 0 .

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita**
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver



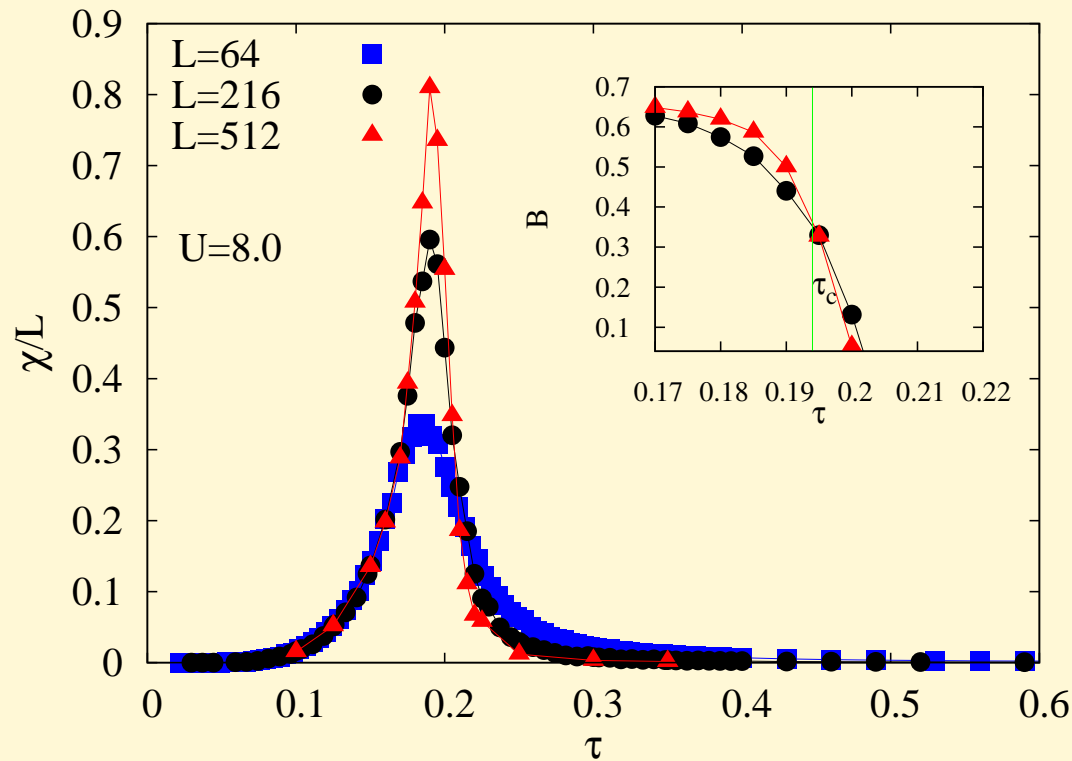
- $S_q^w(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2L} \sum_{j,k} e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} (w_j w_k)$
- Nízko teplotné maximum sa objavuje pri teplotách, kde sa štruktúrny faktor mení z 1 na ~ 0 .
- Maximum je možné použiť na odhad kritickej teploty.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita**
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver



- Podobne sa dá odhadnúť kritická teplota aj pomocou takto definovanej susceptibility: $\chi = \beta(\langle S_q^2 \rangle - \langle S_q \rangle^2)$

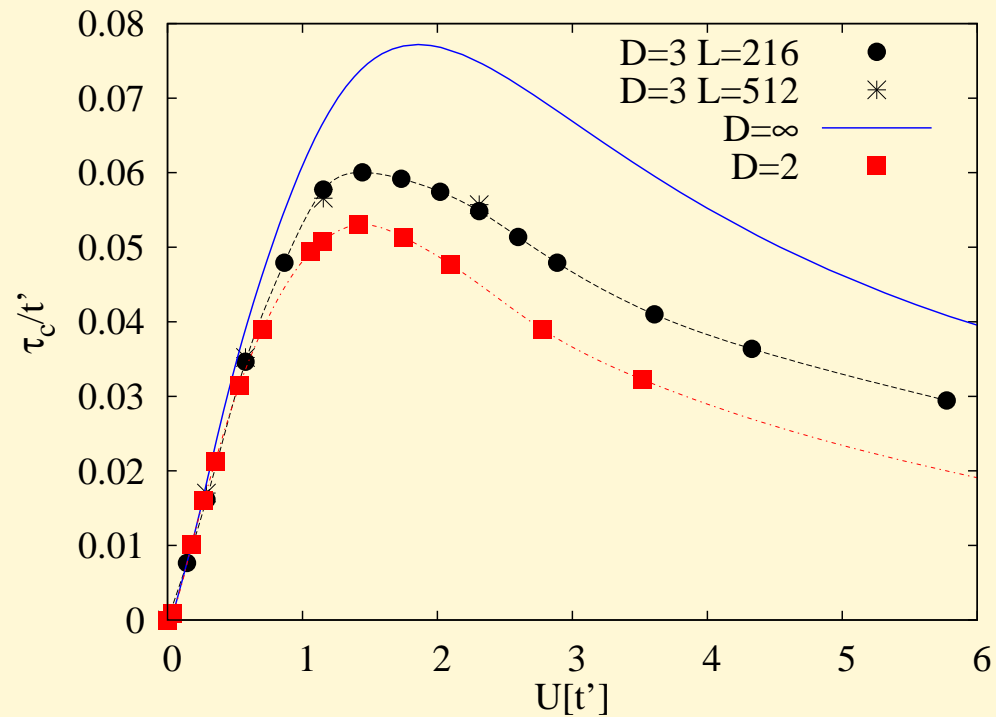
- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita**
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver



- Podobne sa dá odhadnúť kritická teplota aj pomocou takto definovanej susceptibility: $\chi = \beta(\langle S_q^2 \rangle - \langle S_q \rangle^2)$
- Ako kontrolu sme použili polohu priesečníka Binderových kumulantov:

$$B = 1 - \frac{\langle \nu_f^4 \rangle}{3\langle \nu_f^2 \rangle^2}, \text{ kde } \nu_f = \sum_{i \in A} w_i - \sum_{i \in B} w_i$$

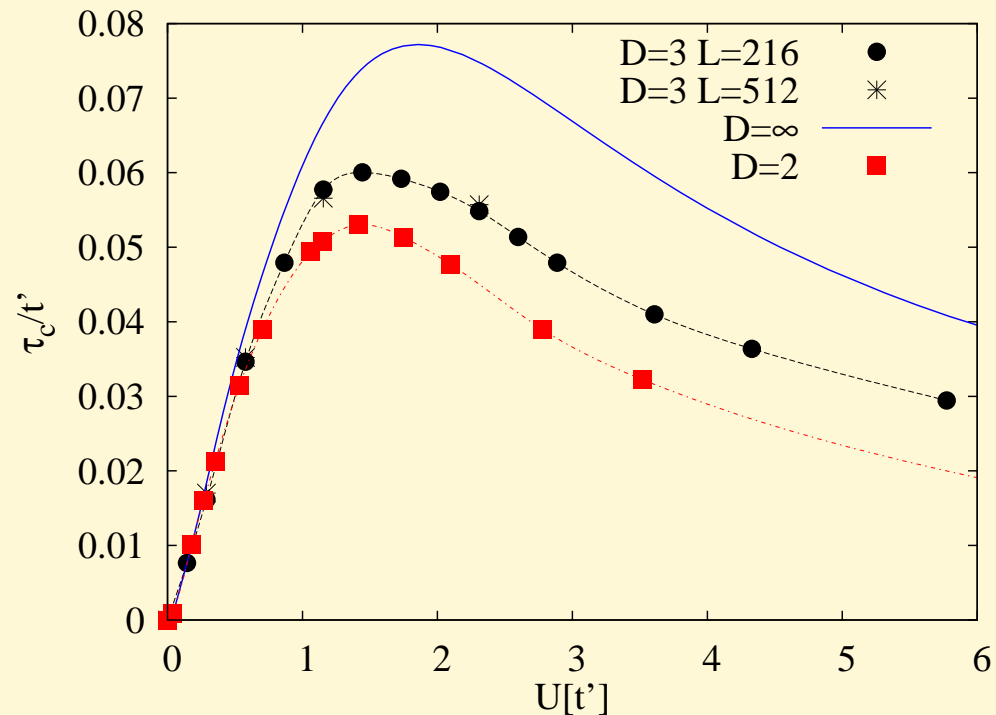
- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita**
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver



- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty**
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[3] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B **74** 035109 (2006)

[4] L. Chen et al., Phys. Rev. B **68** 153102 (2003)

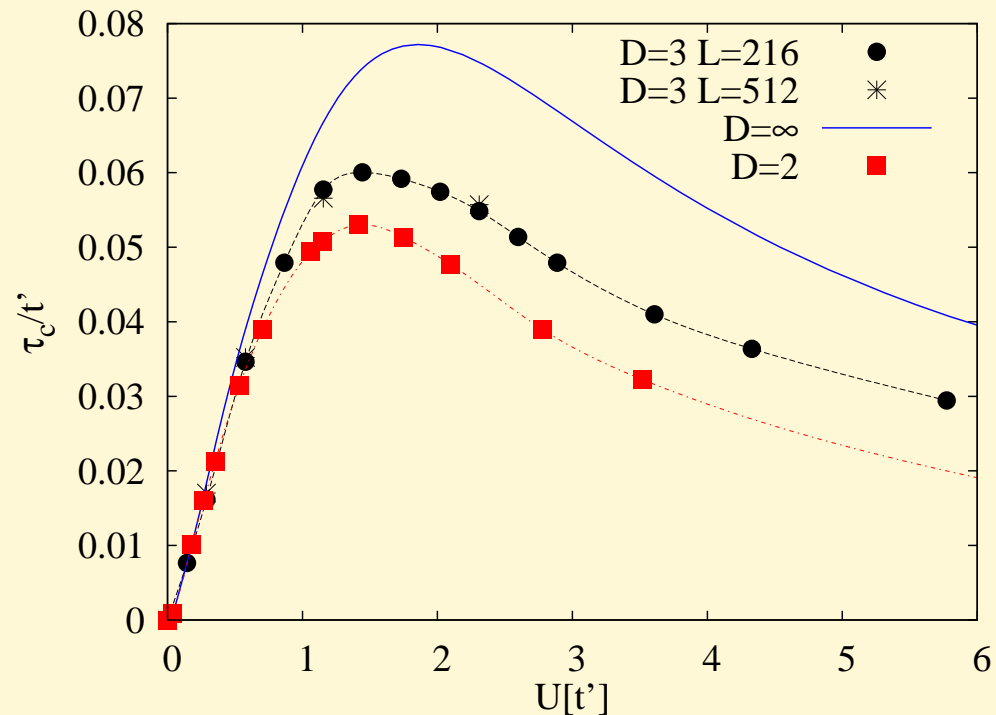


- Za účelom porovnania výsledkov pre rôzne dimezie boli použité iné jednotky: $t' = 2t\sqrt{D}$

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty**
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[3] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B **74** 035109 (2006)

[4] L. Chen et al., Phys. Rev. B **68** 153102 (2003)

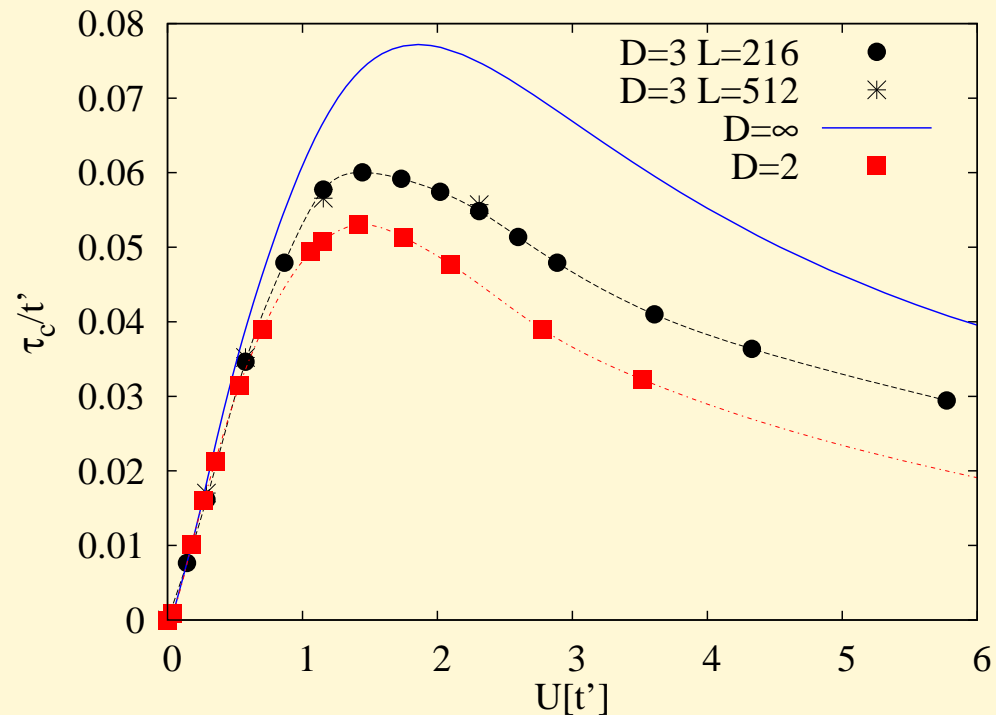


- Za účelom porovnania výsledkov pre rôzne dimezie boli použité iné jednotky: $t' = 2t\sqrt{D}$
- Kritické teploty v $D = 3$ sú podstatne vyššie ako pre $D = 2$ ^[3] a nižšie ako pre $D = \infty$ ^[4].

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty**
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[3] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B **74** 035109 (2006)

[4] L. Chen et al., Phys. Rev. B **68** 153102 (2003)



- 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 $D = 2$ ^[3] a nižšie ako pre $D = \infty$ ^[4].
- Maximum pri ktorom dochádza k prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy sa posúva s dimenziou k vyšším hodnotám U .

[3] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B **74** 035109 (2006)

[4] L. Chen et al., Phys. Rev. B **68** 153102 (2003)

Druh fázového prechodu

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

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty**
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[5] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B 74 035109 (2006)

[6] M. Challa et al., Phys. Rev. B 34 1841 (1986); C. Borgs, R. Kotecký, JSP 61 79 (1990)

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
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty**
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[5] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B 74 035109 (2006)

[6] M. Challa et al., Phys. Rev. B 34 1841 (1986); C. Borgs, R. Kotecký, JSP 61 79 (1990)

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^[5], že pre $U \leq 1$ ide o fázový prechod prvého druhu.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty**
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[5] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B 74 035109 (2006)

[6] M. Challa et al., Phys. Rev. B 34 1841 (1986); C. Borgs, R. Kotecký, JSP 61 79 (1990)

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^[5], že pre $U \leq 1$ ide o fázový prechod prvého druhu.
- Ako na to v $D = 3$?

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty**
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[5] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B 74 035109 (2006)

[6] M. Challa et al., Phys. Rev. B 34 1841 (1986); C. Borgs, R. Kotecký, JSP 61 79 (1990)

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^[5], 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
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty**
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[5] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B 74 035109 (2006)

[6] M. Challa et al., Phys. Rev. B 34 1841 (1986); C. Borgs, R. Kotecký, JSP 61 79 (1990)

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^[5], 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.^[6]..:

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty**
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[5] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B 74 035109 (2006)

[6] M. Challa et al., Phys. Rev. B 34 1841 (1986); C. Borgs, R. Kotecký, JSP 61 79 (1990)

Druh fázového prechodu

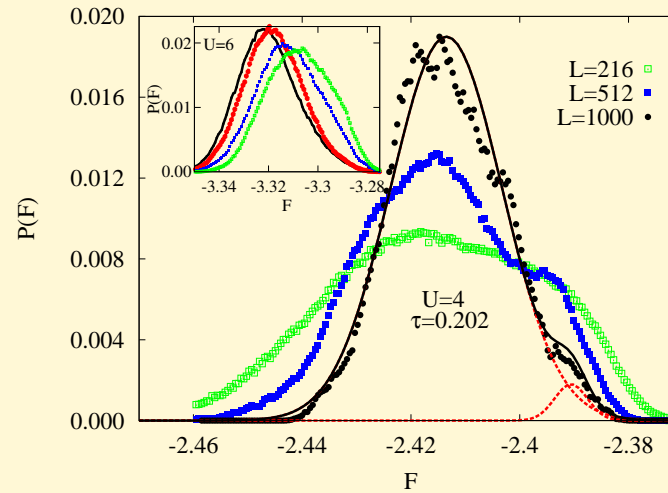
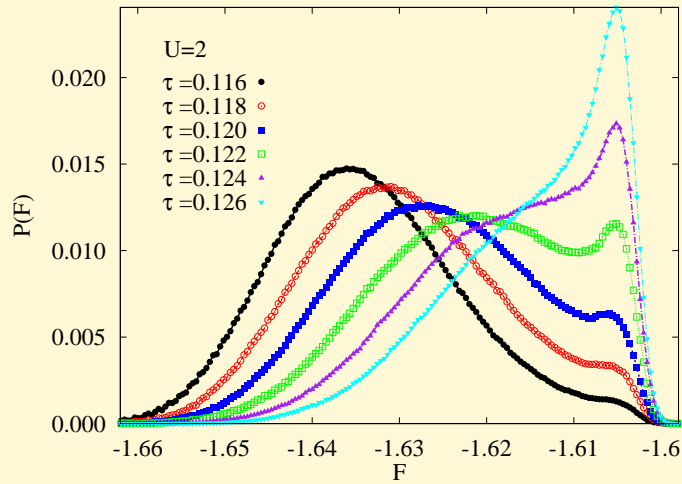
- Akého druhu sú fázové prechody z usporiadanej do neusporiadanej fázy?
- V limite silne coulombovskej interakcie je možné MFK previesť na antiferomagnetický Isingov model, teda v tejto limite ide o fázový prechod druhého druhu.
- V $D = 2$ bolo ukázané^[5], že pre $U \leq 1$ ide o fázový prechod prvého 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.^[6].: 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
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty**
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

[5] M.M. Maška, K. Czajka, Phys. Rev. B 74 035109 (2006)

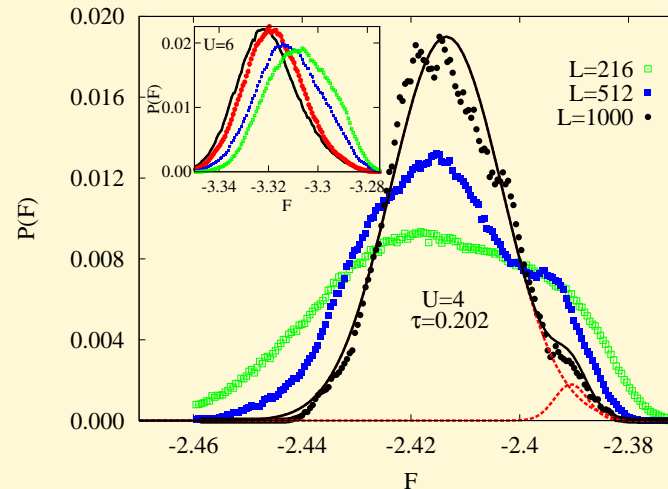
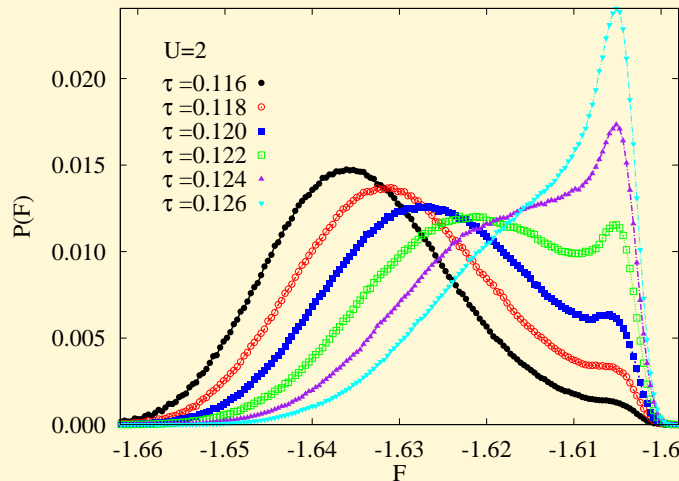
[6] M. Challa et al., Phys. Rev. B 34 1841 (1986); C. Borgs, R. Kotecký, JSP 61 79 (1990)

Distribúcia elektrónovej voľnej energia



- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F**
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

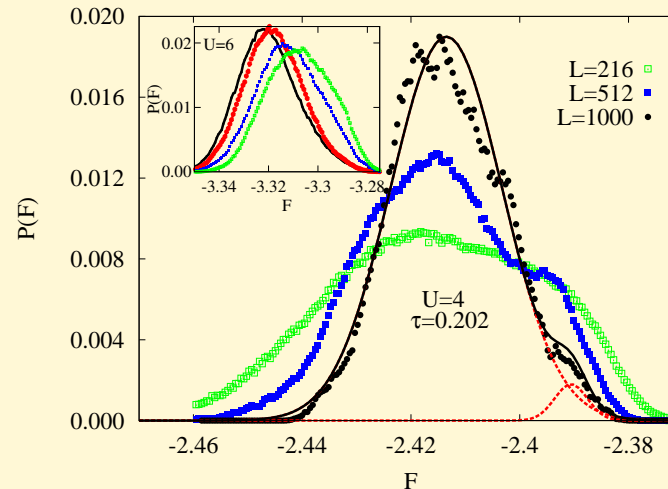
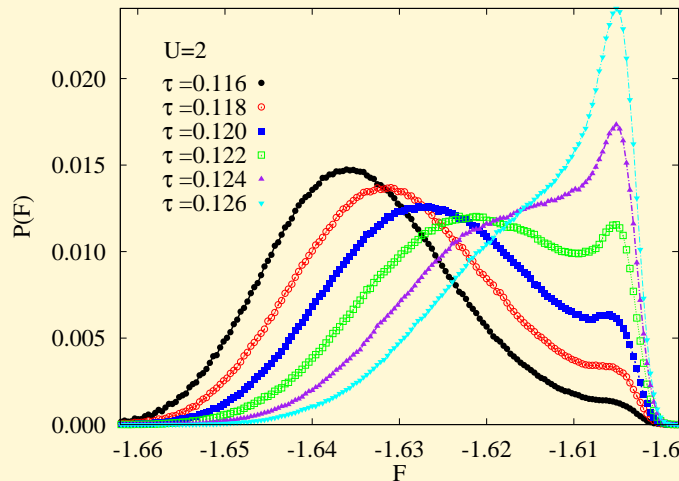
Distribúcia elektrónovej voľnej energia



- 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
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F**
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

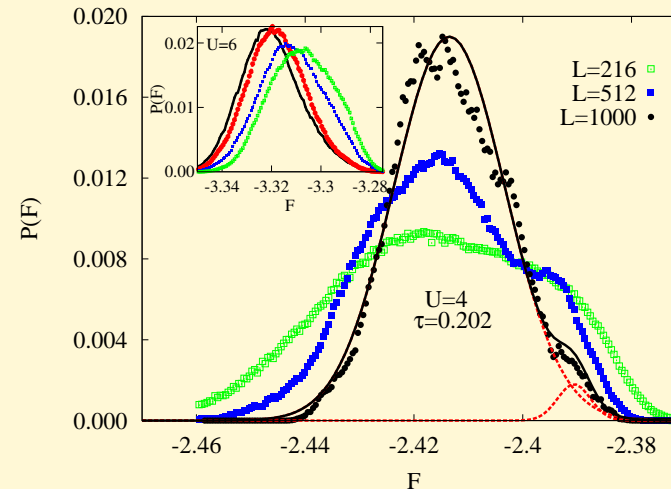
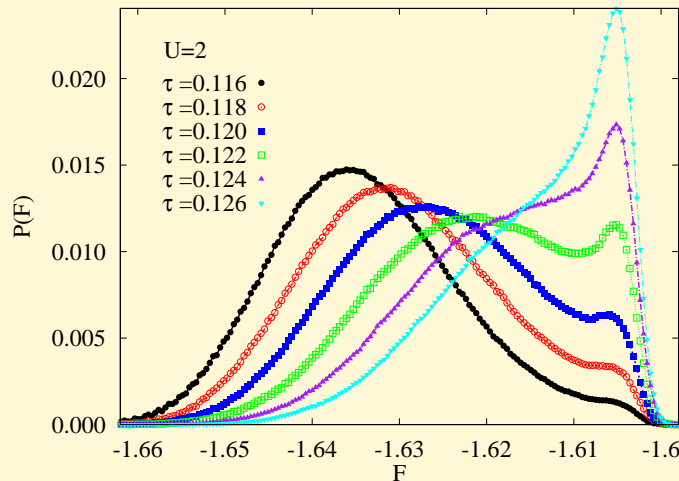
Distribúcia elektrónovej voľnej energia



- 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
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F**
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

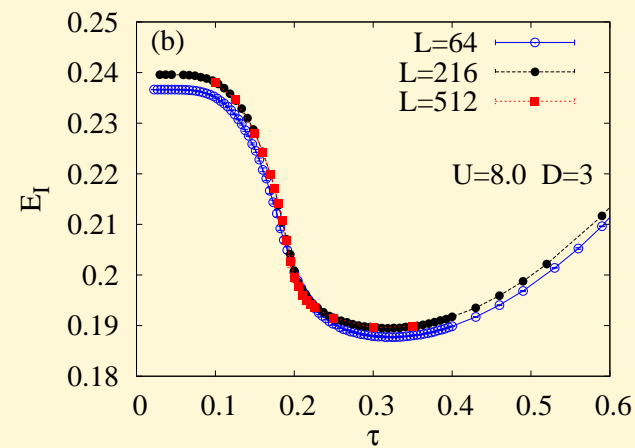
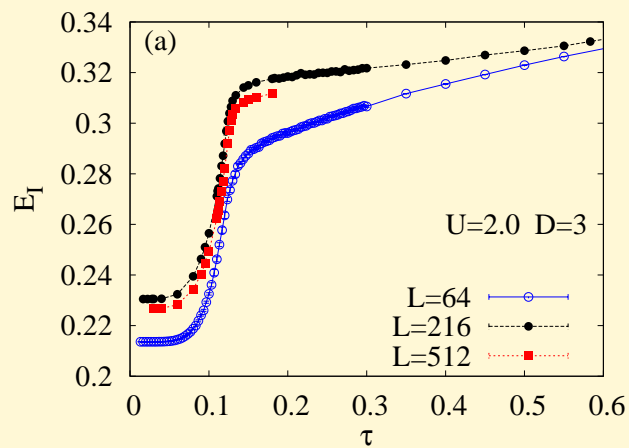
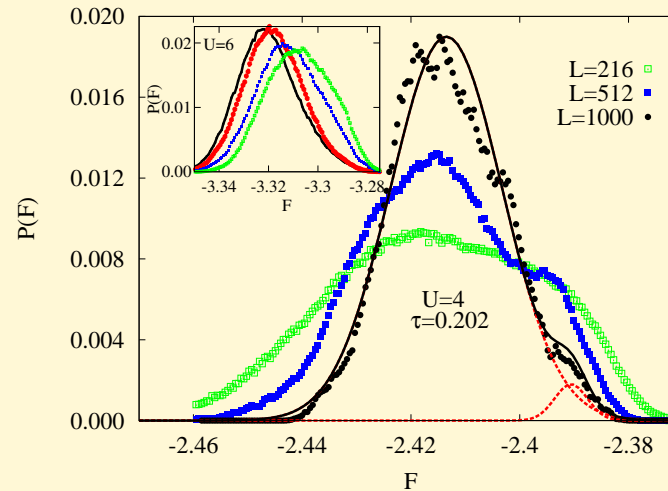
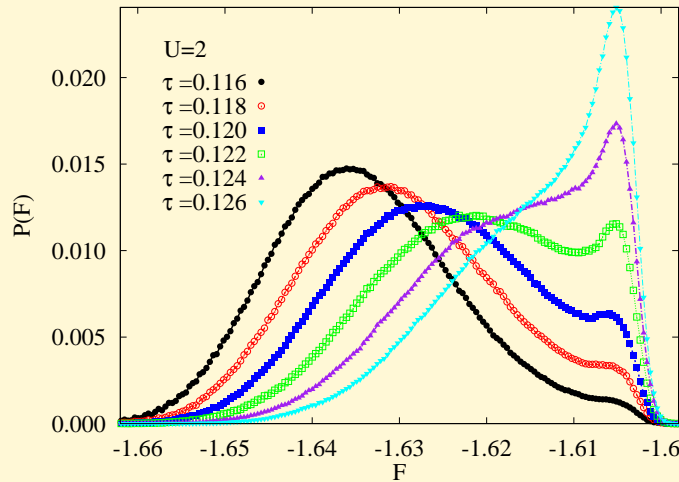
Distribúcia elektrónovej voľnej energia



- 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.

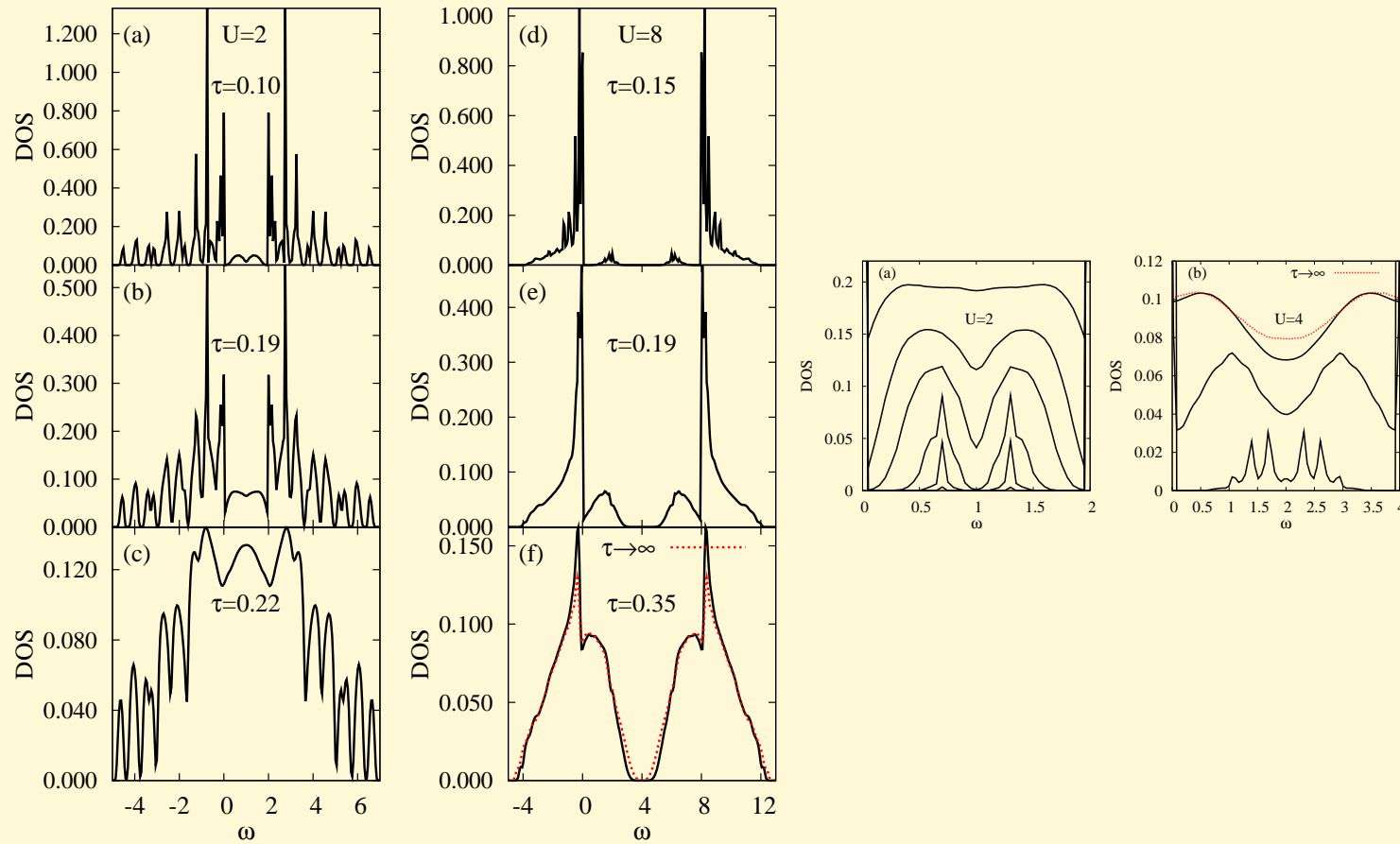
- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F**
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

Distribúcia elektrónovej voľnej energia



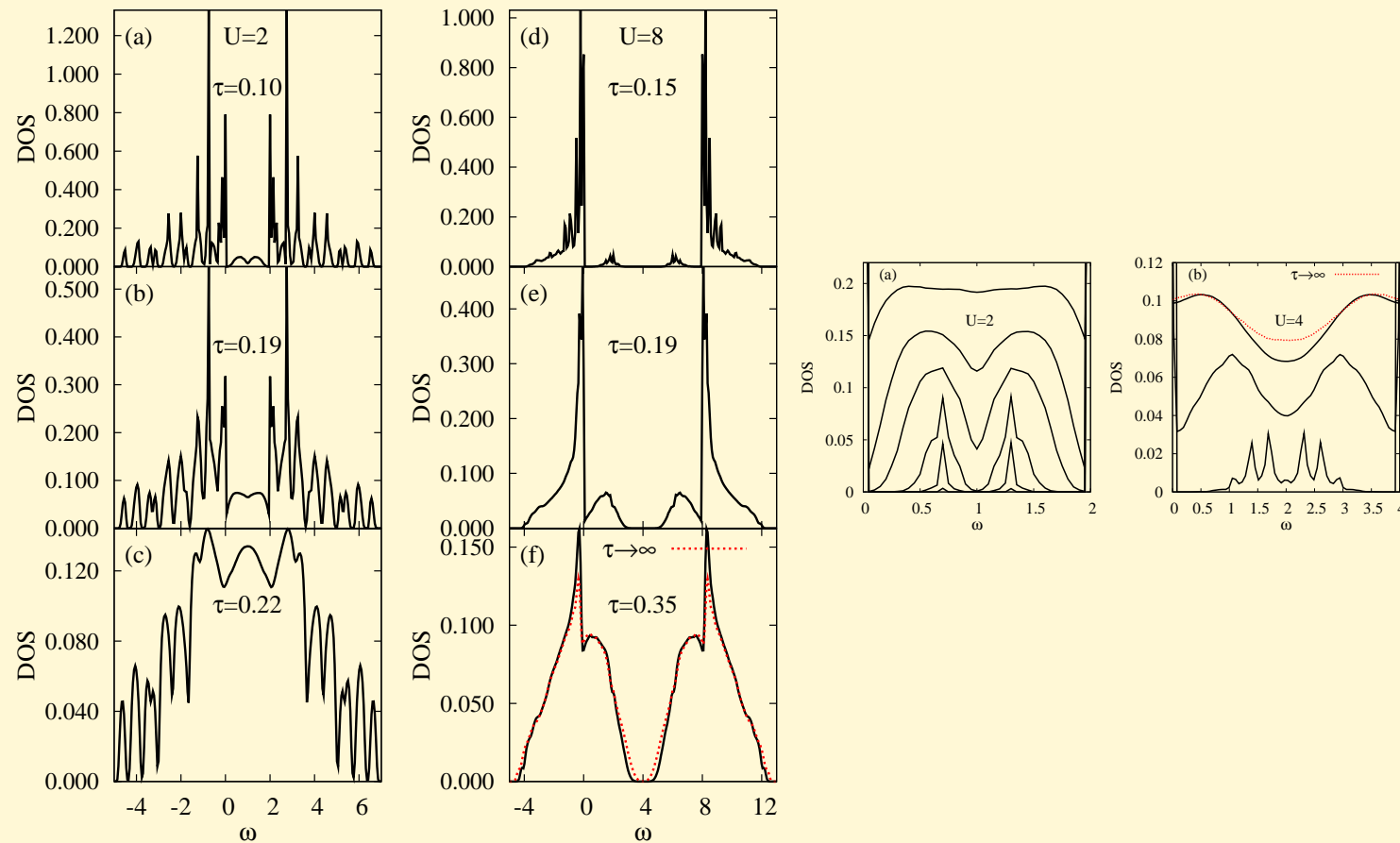
- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F**
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver

Hustota d -elektrónových stavov (DOS)



- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS**
- Homogénna fáza
- Záver

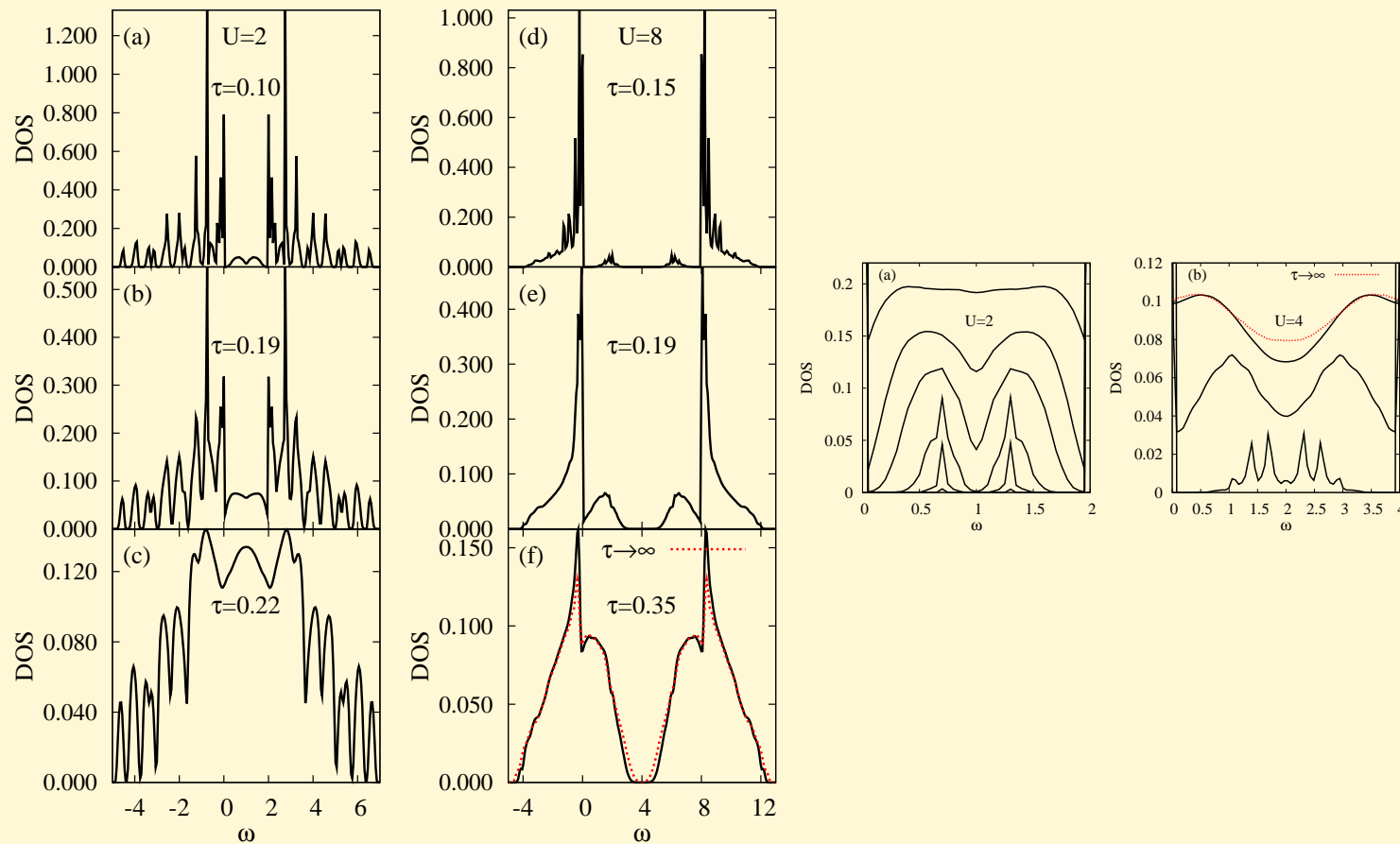
Hustota d -elektrónových stavov (DOS)



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

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS**
- Homogénna fáza
- Záver

Hustota d -elektrónových stavov (DOS)

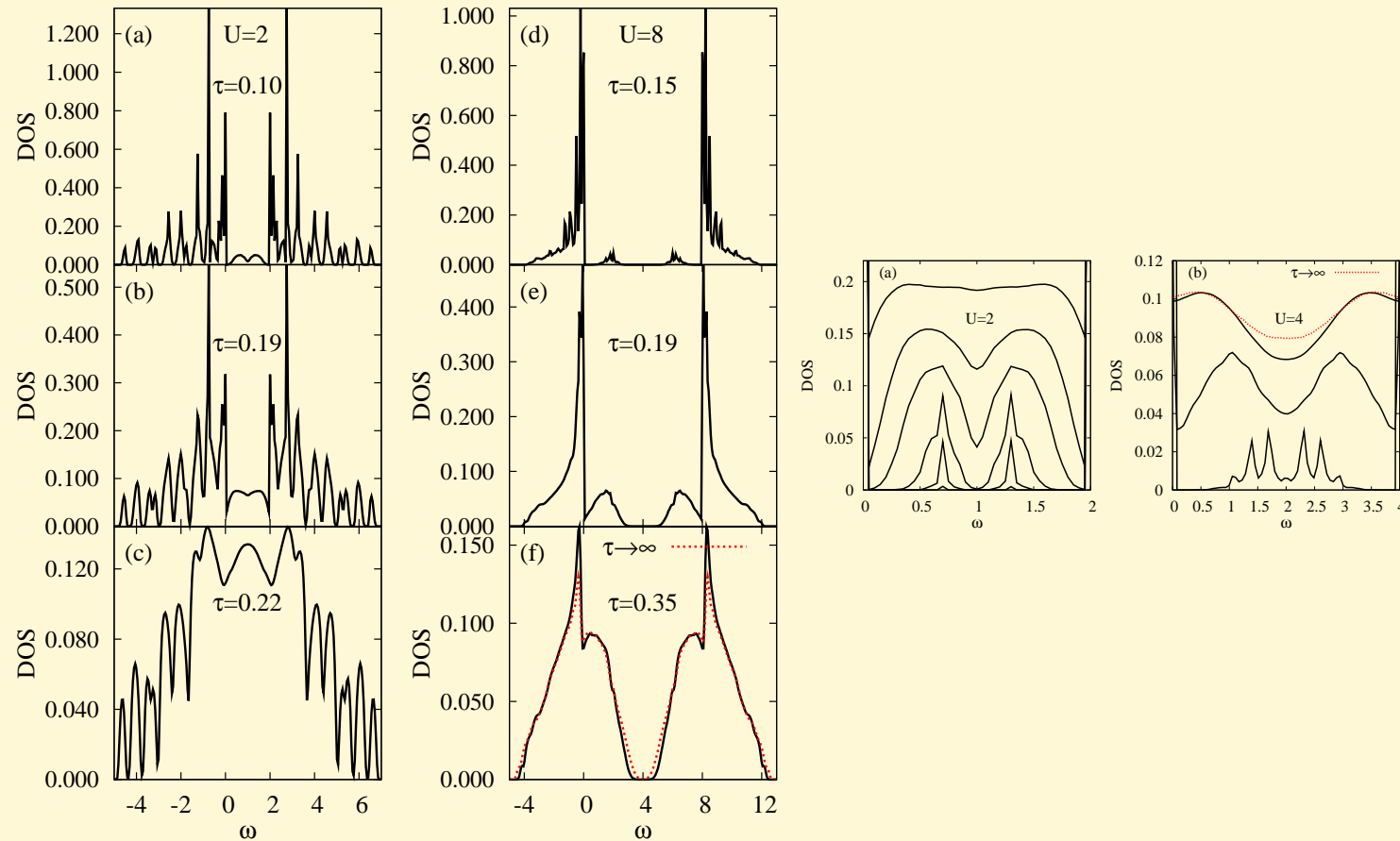


- S narastajúcou teplotou sa v DOS v oblasti $0 < \omega < U$ objavuje jemná štruktúra (JŠ).
- JŠ prechádza pre malé a stredné hodnoty U do pseudo medzery. (Prechod kov-izolátor)

Obsah

- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS**
- Homogénna fáza
- Záver

Hustota d -elektrónových stavov (DOS)

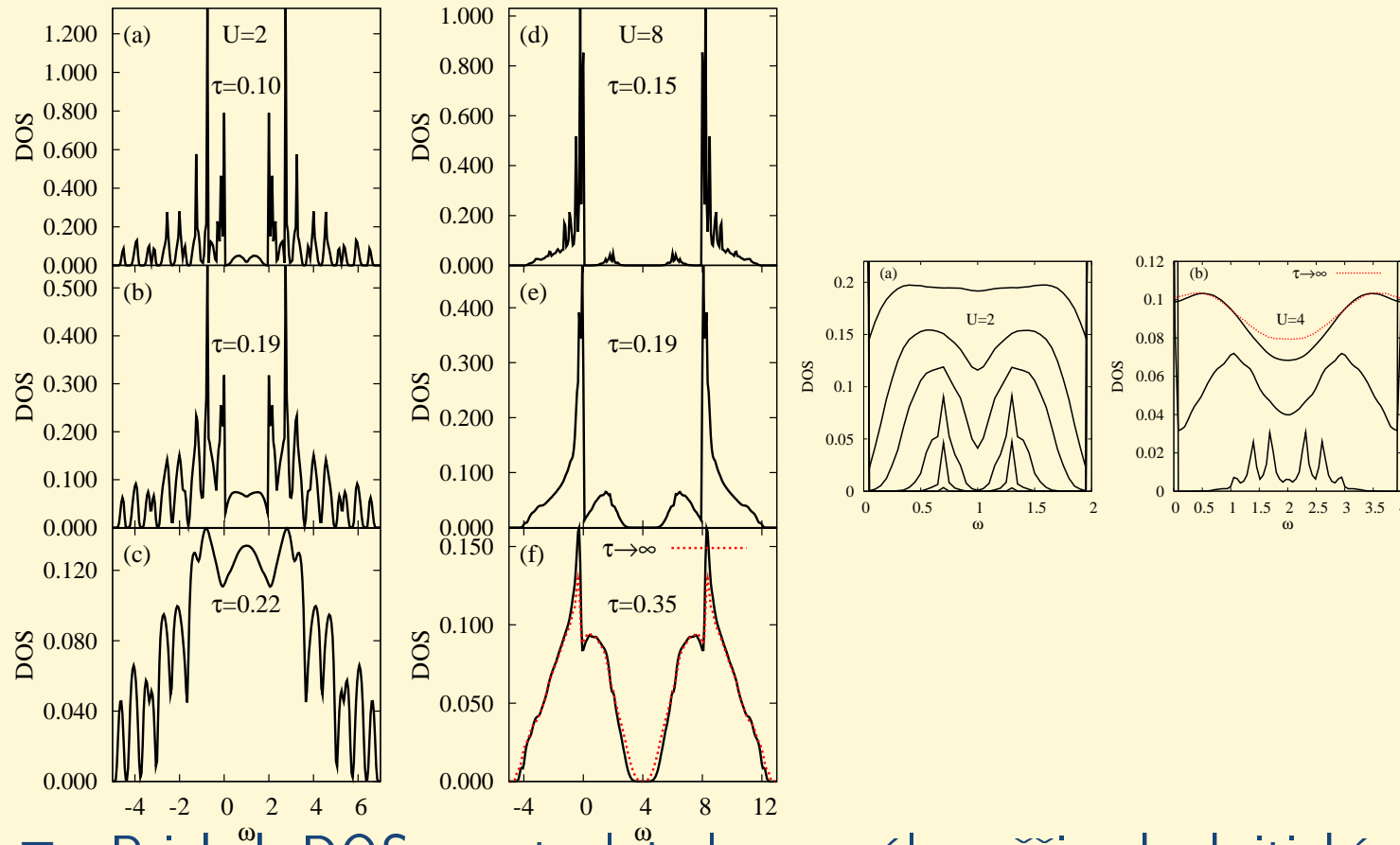


- S narastajúcou teplotou sa v DOS v oblasti $0 < \omega < U$ objavuje jemná štruktúra (JŠ).
- JŠ prechádza pre malé a stredné hodnoty U do pseudo medzery. (Prechod kov-izolátor)
- V limite silnej interakcie JŠ znižuje šírku energetickej medzery.

Obsah

- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS**
- Homogénna fáza
- Záver

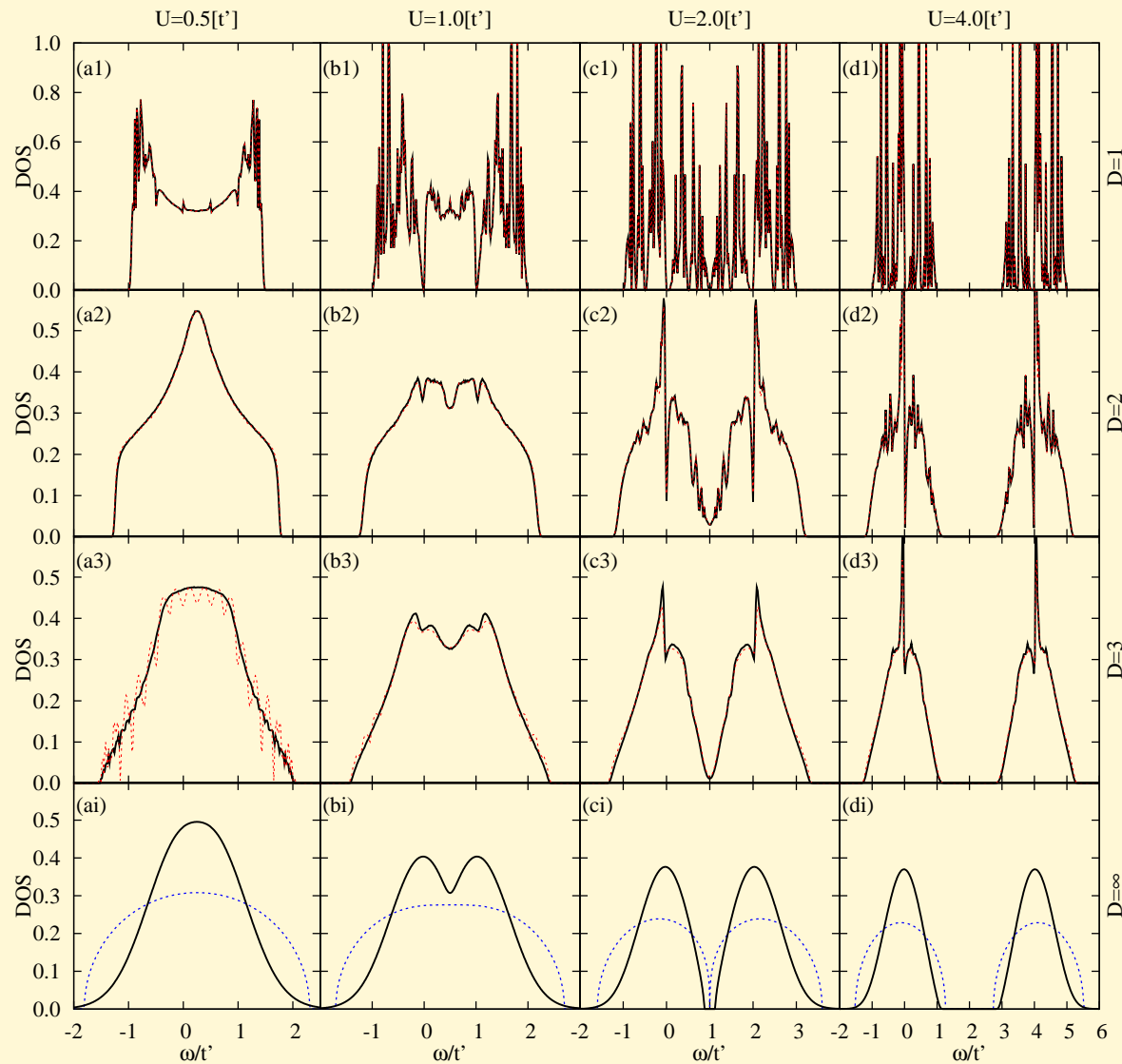
Hustota d -elektrónových stavov (DOS)



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

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS**
- Homogénna fáza
- Záver

DOS v neusporiadanej fáze



- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza**
- Záver

- Krátko som predstavil niektoré metódy, ktoré je možné použiť na štúdium MFK.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**

- Krátko som predstavil niektoré metódy, ktoré je možné použiť na štúdium MFK.
- Použili sme semi-klasické Monte-Carlo na štúdium rôznych fázových prechodov v MFK v $D = 3$:

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**

- Krátko som predstavil niektoré metódy, ktoré je možné použiť na štúdium MFK.
- Použili sme semi-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 porovnali kritické teploty prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy v rôznych dimenziách.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**

- Krátko som predstavil niektoré metódy, ktoré je možné použiť na štúdium MFK.
- Použili sme semi-klasické Monte-Carlo na štúdium rôznych fázových prechodov v MFK v $D = 3$:
 - ◆ Na základe maximálného tepla sme skonštruovali fázový diagram v rovine $(U-\tau)$, kde sme porovnali kritické teploty prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy v rôznych dimenziách.
 - ◆ Ukázali sme, že 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
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**

- Krátko som predstavil niektoré metódy, ktoré je možné použiť na štúdium MFK.
- Použili sme semi-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 porovnali kritické teploty prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy v rôznych dimenziách.
 - ◆ Ukázali sme, že 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
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**

- Krátko som predstavil niektoré metódy, ktoré je možné použiť na štúdium MFK.
- Použili sme semi-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 porovnali kritické teploty prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy v rôznych dimenziách.
 - ◆ Ukázali sme, že 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 neusporiadanej fáze sme diskutovali rozdiely v DOS pre rôzne dimenzie.

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**

- Krátko som predstavil niektoré metódy, ktoré je možné použiť na štúdium MFK.
- Použili sme semi-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 porovnali kritické teploty prechodu z usporiadanej do neusporiadanej fázy v rôznych dimenziách.
 - ◆ Ukázali sme, že 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 neusporiadanej fáze sme diskutovali rozdiely v DOS pre rôzne dimenzie.
- Práca bola publikovaná v Solid State Communications link:
<http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2009.08.035>

- Obsah
- Silne korelované elektrónové systémy
- MFK
- Metódy
- Metódy ZS
- Metódy Term.
- Tepelná kapacita
- Susceptibilita
- Kritické teploty
- Distribúcia F
- DOS
- Homogénna fáza
- Záver**

Ďakujem za pozornosť

Obsah
Silne korelované
elektrónové systémy
MFK
Metódy
Metódy ZS
Metódy Term.
Tepelná kapacita
Susceptibilita
Kritické teploty
Distribúcia F
DOS
Homogénna fáza
Záver