



Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky



Martin Dian

Autoreferát dizertačnej práce

**Nové javy v systémoch interagujúcich elektrónov a v spinových
systémoch**

na získanie akademického titulu philosophiae doctor

**v odbore doktorandského štúdia: 4.1.2 Všeobecná fyzika a
matematická fyzika**

Bratislava 2014

**Dizertačná práca bola vypracovaná v dennej forme doktorandského štúdia
na Katedre experimentálnej fyziky FMFI UK**

Predkladateľ: Mgr. Martin Dian
Katedra experimentálnej fyziky
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského v Bratislave

Školiteľ: doc. RNDr. Richard Hlubina, DrSc.
Katedra experimentálnej fyziky
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského v Bratislave

Oponenti: prof. RNDr. Peter Markoš, DrSc.
Ústav jadrového a fyzikálneho inžinierstva, FEI STU

doc. RNDr. Martin Moško, DrSc.
Elektrotechnický ústav SAV

doc. RNDr. Igor Medved', PhD.
Katedra fyziky
Fakulta prírodných vied
Univerzita Konštantína Filozofa v Nitre

**Obhajoba dizertačnej práce sa koná o h
pred komisiou pre obhajobu dizertačnej práce v odbore 4.1.2 Všeobecná fyzika a
matematická fyzika vymenovanou predsedom odborovej komisie Prof. RNDr.
Petrom Prešnajderom, DrSc. na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky, Mlynská
dolina 842 48 Bratislava.**

Predseda odborovej komisie:

Prof. RNDr. Peter Prešnajder, DrSc.
Oddelenie teoretickej fyziky
Katedry teoretickej fyziky a didaktiky fyziky
Fakulty matematiky fyziky a informatiky UK

Obsah

Úvod	1
1. Predpovede minimálneho modelu pri konečnej teplote	2
2. Zvyškový odpor v zliatine FeGe pod tlakom	6
3. Fáza spinového řadu v modifikovanom XY modeli	8
Záver	11
English Summary	13
Zoznam prác tvoriacich dizertáciu	14
Literatúra	14

Úvod

V predkladanej práci budeme skúmať fázové prechody v systémoch s pohyblivými elektrónmi a v spinových modeloch. Zaoberáme sa pritom nasledovnými témami:

(1) Elektrónová hmota sa môže nachádzať v rôznych fázach: paramagnetický kov, feromagnetický kov, izolujúca fáza, rôzne supravodivé fázy, fázy s iným typom magnetického usporiadania, atď. Skúmanie takýchto fázových diagramov tvorí jadro modernej fyziky tuhých látok.

Medzi zaujímavé typy fázového prechodu interagujúcich elektrónov patrí Mottov prechod kov-izolant. Podstatou tohto prechodu je, že ak sú interakcie medzi elektrónmi dostatočne silné, prechádza kovový stav do stavu izolujúceho. Elektróny sú v izolujúcom stave magneticky usporiadané dôsledkom lokalizácie náboja.

V izoelektrickej a izoštruktúrnej zliatine $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ však bol experimentálne pozorovaný úplne iný typ fázového prechodu kov-izolant[1]. FeSi je zlúčenina s menšou mriežkovou konštantou ako FeGe, teda koncentrácia atómov je väčšia, elektrónové interakcie sú relatívne slabšie a naivne by sme očakávali, že FeSi je kov a FeGe izolant. Experiment však tvrdí presný opak: FeSi je izolant a FeGe kov!

Na druhej strane FeSi je nemagnetický materiál[2], pričom viac korelované FeGe je magneticky usporiadané s veľkým magnetickým momentom $\sim 1\mu_B$ na atóm železa[3, 4]. Takéto poradie fáz je v zhode so štandardnou predstavou o koreláciami indukovanom magnetizme. Zdá sa teda, že sa jedná práve o magnetizmus, ktorý spôsobuje nezvyčajný prechod kov-izolant vo $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$. [5] V roku 2009 bol navrhnutý minimálny model pre fázový prechod kov-izolant

indukovaný magnetizmom[6]. Autori skúmali fázový diagram minimálneho modelu pomocou priblíženia stredného poľa, v limite nulovej teploty. O dva roky neskôr boli v minimálnom modeli zahrnuté aj korelačné efekty, no model pri konečnej teplote doposiaľ nebol skúmaný.

V dizertačnej práci budeme skúmať minimálny model zavedený v [6] pri konečnej teplote pomocou teórie stredného poľa. Najprv budeme prezentovať minimálny model a jeho parametre, pre ktoré budeme model študovať. Odvodíme selfkonzistentné rovnice pomocou variačného princípu. Ukážeme, že fázový diagram minimálneho modelu pozostáva z paramagnetickej a feromagnetkej fázy a budeme študovať vlastnosti niektorých dôležitých fyzikálnych veličín v oboch fázach.

(2) Namiesto aplikovania chemického tlaku, t.j. postupného nahrádzania atómov germánia izoelektronickými ale menšími atómami kremíka v kovovom FeGe, môžeme zmenšovanie mriežkovej konštanty v zlúčenine FeGe dosiahnuť aj aplikovaním veľkých tlakov[7]. V experimente boli dosiahnuté tlaky 30 GPa, no žiaden fázový prechod do izolujúcej fázy nebol pozorovaný. Bola však pozorovaná anomália nízkoteplotného odporu pri kritickom tlaku $p_c \approx 19$ GPa. V práci [8] bola táto anomália interpretovaná ako prechod medzi plne polarizovaným magnetom pri malých tlakoch a iba čiastočne polarizovaným magnetom pri vyšších tlakoch. Tento návrh bol motivovaný predstavou, že podľa minimálneho modelu pri kritickom tlaku p_c vznikne Fermiho plocha pre (pomalé) minoritné elektróny, čím sa otvorí nový rozptylový kanál pre majoritné elektróny a odpor musí začať rásť. V práci [8] však neboli prezentované žiadne výpočty transportných veličín, preto ďalším cieľom dizertačnej práce bude overenie tejto hypotézy.

(3) V poslednej časti dizertačnej práce budeme študovať modifikovaný XY model na štvorcovej mriežke. Hoci obyčajné usporiadanie pri konečných teplotách v klasických dvojrozmerných systémoch so spojitou symetriou nie je možné [9], napriek tomu sa v týchto systémoch realizujú fázové prechody. Najznámejším typom prechodu v XY modeloch je Kosterlitzov-Thoulesov fázový prechod [10] medzi nízkoteplotnou fázou s viazanými párami vírov a antivírov a vysokoteplotnou fázou s voľnými vírami a antivírami. Pri zapnutí nematickej interakcie medzi jednotlivými najbližšími susedami sa model stáva ešte zaujímavejší. Okrem fázových prechodov typu KT sa v takto modifikovanom modeli realizuje aj 2D Isingov fázový prechod medzi magnetickou a nematickou fázou [11, 12, 13]. Situácia je ešte zaujímavejšia, ak je naviac znamienko nematickej interakcie opačné ako v magnetickej interakcii [14, 15]. Počas magisterského štúdia sme v diplomovej práci skúmali tento model, práve s opačným znamienkom. Našli sme fázový diagram, ktorý pozostáva zo štyroch fáz: magnetická, nematická, magneticko-nematická a paramagnetická fáza. V dizertačnej práci sa budeme venovať najmä detailnejšiemu skúmaniu fázového diagramu a vlastnostiam objavených fáz.

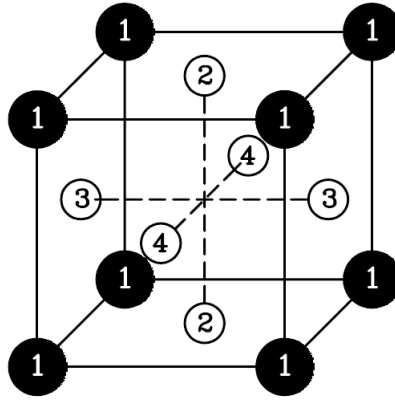
1. Predpovede minimálneho modelu pri konečnej teplote

Autori práce [6] zaviedli teoretický minimálny model pre systém zliatin $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$, ktoré modelovali pomocou Hubbardovho modelu na fcc mriežke pozostávajúcej iba z atómov železa.

V tomto modeli pripadajú v priemere 2 elektróny na každú elementárnu bunku. Hamiltonián pre skúmaný Hubbardov model má nasledovný tvar:

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_{\mathbf{R}\lambda} n_{\mathbf{R}\lambda\uparrow} n_{\mathbf{R}\lambda\downarrow} - \Delta \sum_{\mathbf{R}} (n_{\mathbf{R}1\uparrow} + n_{\mathbf{R}1\downarrow}) - \mathbf{B} \cdot \sum_{\mathbf{R}\lambda\alpha\beta} c_{\mathbf{R}\lambda\alpha}^\dagger c_{\mathbf{R}\lambda\beta} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \quad (1)$$

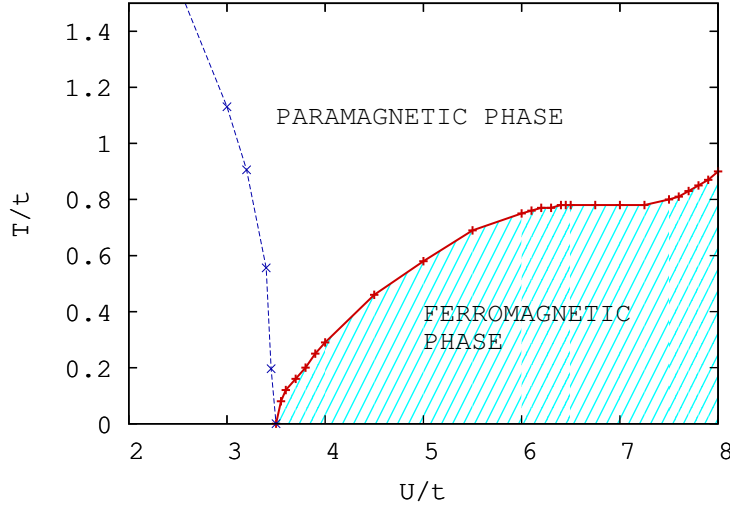
kde posledný člen popisuje väzbu elektrónov na externé magnetické pole \mathbf{B} . $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ je vektor Pauliho matíc. Index \mathbf{i} pozostáva v tomto modeli z dvojice indexov $\mathbf{i} = \{\mathbf{R}, \lambda\}$, pričom \mathbf{R} je mriežkový vektor a λ je poloha atómu v elementárnej bunke. V každej elementárnej bunke fcc kryštálu sú 4 atómy bázy $\lambda = 1, 2, 3, 4$, pričom dodatočný potenciál $-\Delta$ pre elektrón sediaci na podmriežke s $\lambda = 1$ rozlišuje dva typy orbitálov, obr. (1). Ak je potenciál Δ oveľa



Obr. 1: Fcc mriežka s dvoma typmi orbitálov. Čierne atómy odpovedajú orbitálom $\lambda = 1$, biele orbitálom $\lambda = 2, 3, 4$ [6].

väčší ako coulombovské odpudzovanie U , oba elektróny v každej bunke obsadia orbitál $\lambda = 1$ a stav, ktorý vznikol, je paramagnetický izolant. Naopak, ak je coulombovské odpudzovanie U veľké a $\Delta = 0$, jedná sa o štandardný Hubbardov model na fcc mriežke so $\frac{1}{4}$ zaplnením v limite silnej interakcie. Verí sa, že takýto model je plne polarizovaný aj za teóriu stredného poľa [16, 17]. Model (1) má teda rovnaké správanie v oboch limitách ako systém zliatin $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ pre $x = 0$ a $x = 1$. Kritická hodnota coulombovskej interakcie (t.j. hodnota pri ktorej nastáva fázový prechod medzi paramagnetickým izolantom a feromagnetickým kovom) minimálneho modelu (1) pri nulovej teplote je $U_c \approx 3.5$ [6]. Navyše, plne polarizovaný magnet sa stáva čiastočne polarizovaným, pri $U_N \approx 6.4$ [6].

V prácach [6] a [8] bol minimálny model (1) študovaný pri teplote $T = 0$. V práci [M1] sme našli fázový diagram minimálneho modelu (1) pri konečnej teplote v priblížení stredného poľa, ktorý pozostáva z dvoch fáz: paramagnetická fáza (celková magnetizácia je nulová) a feromagnetická fáza s konečnou veľkosťou magnetizácie, pozri obr. 2. Fázový prechod je 2. druhu, čo je v spore s experimentom pre systém zliatin $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ [1]. V nasledovných dvoch odstavcoch zhrnieme naše výsledky pre paramagnetickú izolujúcu fázu a pre feromagnetickú kovovú



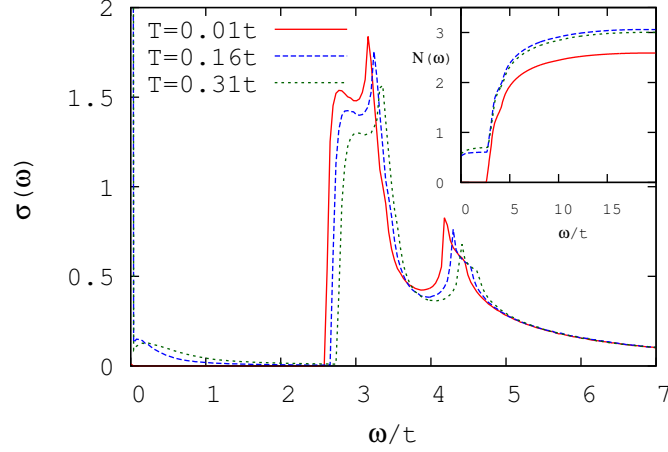
Obr. 2: Fázový diagram minimálneho modelu pri konečnej teplote $T > 0$. Čiarkovaná čiara znázorňuje polohu maxim magnetickej susceptability χ [M1].

fázu:

Paramagnetická izolujúca fáza: Magnetická susceptibilita χ je v základnom nulová. S rastom teploty T , rastie aj susceptibilita, pričom pri teplotách $T/t \approx 1$ dosahuje maximum a následne klesá. Toto maximum sa so zvyšovaním coulombovskej interakcie U posúva k nižším teplotám a jeho veľkosť rastie. Pre U blízke k U_c je toto anomálne správanie v kvalitatívnej zhode s experimentom pre FeSi [2]. V tepelnej kapacite sa pri teplotách $T/t \approx 1$ vyskytuje opäť maximum, podobne ako pre susceptibilitu, no žiadne ďalšie maximum pri teplotách $T < t$ sme nenašli, čo je v rozpore s experimentálnou prácou [2], kde príspevok tepelnej kapacity od elektrónov dosahuje maximum pri teplote $T \approx 300K$. V práci [M1] argumentujeme, že tento nesúlad môže byť spôsobený chybami experimentu. Ďalej sme skúmali optickú vodivosť a našli sme, že v tesnej blízkosti kovovej fázy sa optické spektrum mení s teplotou aj pri frekvenciách $\hbar\omega \approx 4t$, pozri obr. 3. Takéto správanie bolo experimentálne pozorované aj v čistom FeSi [18]. Navyše sumačné pravidlo $\mathcal{N}(\omega) = \int_0^\omega d\nu\sigma(\nu)$ dosahuje v limite vysokých frekvencií ω rôzne hodnoty pri rôznych teplotách, tak ako bolo pozorované v prácach [18, 19].

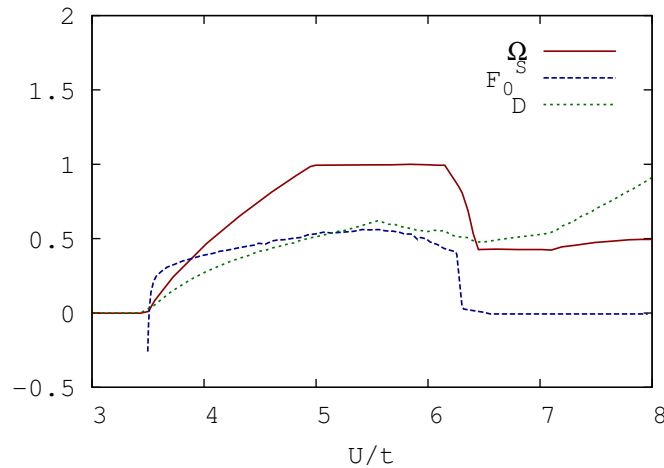
Feromagnetická kovová fáza: Drudeho váha, pozri obr. 4 je podľa očakávania v izolujúcej fáze nulová, $D = 0$ a konečnú hodnotu $D > 0$, nadobúda v kovovej fáze. Veľkosť Fermiho objemu Ω , pozri obr. (4), dosahuje maximum v strede intervalu $U_c < U < U_N$, čo je v kvalitatívnej zhode s experimentom [1], kde merali koeficient $\gamma = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{C(T)}{T}$, pre systém zliatin FeSi_{1-x}Ge_x, ktorý má maximum pre $x_c \lesssim x \lesssim x_N$. V Landauovej teórii Fermiho kvapaliny súvisí stlačiteľnosť κ s hustotou stavov N nasledovne:

$$\kappa(\mu) = \frac{N(\mu)}{1 + F_0^S}, \quad (2)$$



Obr. 3: Optická vodivosť $\sigma(\omega)$ minimálneho modelu (1) pri rôznych teplotách [M1]. V pravom hornom rohu je zobrazené sumačné pravidlo $\mathcal{N}(\omega) = \int_0^\omega d\nu \sigma(\nu)$.

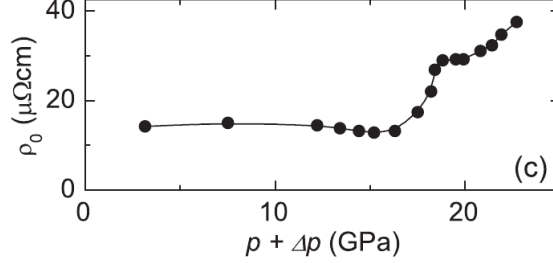
kde F_0^S je Landauov parameter a μ je chemický potenciál. Z merania stlačiteľnosti $\kappa(\mu)$ a z hustoty stavov $N(\mu)$ sme teda našli, že tesne pod hodnotou U_N Landauov parameter skokovo narastie. S postupným znižovaním interakcie pozvoľna klesá. Interakcie takéhoto systému s kladným a konečným $F_0^S > 0$ sú odpudivé. V tesnej blízkosti U_c Landauov parameter klesá až do záporných hodnôt, čo znamená prítomnosť príťažlivých interakcií. Túto anomáliu plánujeme detailnejšie skúmať v budúcnosti. Z výsledkov získaných pre Fermiho objem Ω , Drudeho váhy D a Landauovho parametra F_0^S vidno, že fázový prechod nie je podľa Brinkmannovho-Riceovho scenáru, ale v našom prípade nosiče náboja v kritickom bode U_c úplne vymiznú. Ďalšie detaily nájde čitateľ v práci [M1].



Obr. 4: Závislosť Fermiho objemu Ω , Landauovho parametra F_0^S a Drudeho váhy D od coulombovskej interakcie U pri teplote $T/t = 0.002$ [M1].

2. Zvyškový odpor v zliatine FeGe pod tlakom

V [M2] sme skúmali zvyškový odpor zliatiny FeGe pod tlakom, ktorý bol experimentálne meraný v [2], pozri obr.5. V dokonalých vzorkách by odpor pri nulovej teplote mal byť nulový,



Obr. 5: Závislosť zvyškového elektrického odporu od tlaku zliatiny FeGe pri nízkych [7].

preto vysvetlenie obr. 5 sme hľadali analýzou elastického rozptylu elektrónov na nedokonalostiach mriežky. V obyčajnom feromagnete by sme očakávali iba prítomnosť diagonálneho člena vo výraze pre potenciálový rozptyl. Vo FeGe sa však interné výmenné pole mení špirálovito [20]. Špirálovanie sme preto modelovali jednoduchým hamiltoniánom, ktorý opisuje elektrónové spinory:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{J}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-iqz} \\ e^{iqz} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

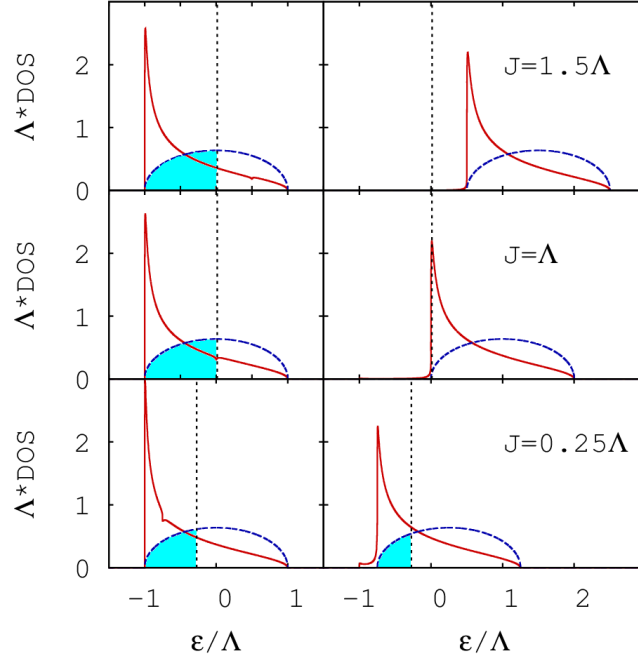
kde J je výmenné pole medzi spinormi. Predpokladali sme pritom, že s rastúcim tlakom hodnota parametra J klesá. Ukázali sme, že prítomnosť bodových defektov s riedkou koncentráciou n_{imp} možno modelovať prímiesnym potenciálom:

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V & W \\ W^* & V \end{pmatrix}, \quad (4)$$

kde V je spinovo-diagonálna časť a W popisuje rozptyly so súčasným preklopením spinu elektrónov, pričom $|W|/|V| \sim 10^{-2}$. Rozptyl na jednej prímesi s potenciálom \hat{V} sme skúmali presne pomocou zovšeobecnenia Lippmannovej-Schwingerovej rovnice pre maticu rozptylu $\hat{T}(\varepsilon)$ [21] na prípad s nediagonálnym rozptylom.

Uvažovali sme štvrtinové zaplnenie pásov a pre modelové polkruhové hustoty stavov sme našli lokálne hustoty stavov v mieste prímesi, obr. 6. Pre $J > J_c = \Lambda$ je majoritný pás \uparrow zaplnený do polovice a minoritný pás \downarrow je prázdny. Takýto stav je plne polarizovaný. Pre $J < J_c$ je časť obsadených stavov v páse aj pre spiny \downarrow , a teda tento stav je čiastočne polarizovaný, pozri obr. 6.

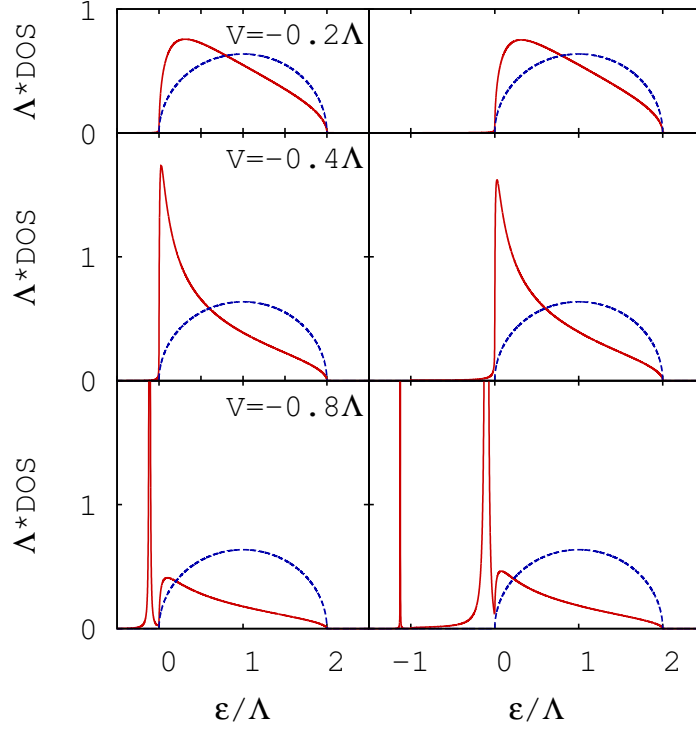
Na obr. 7 je vykreslená lokálna hustota stavov minoritného pásu v mieste nečistoty pre $J = J_c = \Lambda$ a rôzne hodnoty prímiesného potenciálu \hat{V} . Pre slabé interakcie $V = -0.2 \Lambda$ sa lokálna hustota stavov líši len veľmi málo od neporušenej hustoty stavov. Pre $V = -0.4 \Lambda$ vzniká ostré maximum v blízkosti energií $\varepsilon = 0$. V oboch prípadoch $V = -0.2 \Lambda$ a $V = -0.4 \Lambda$



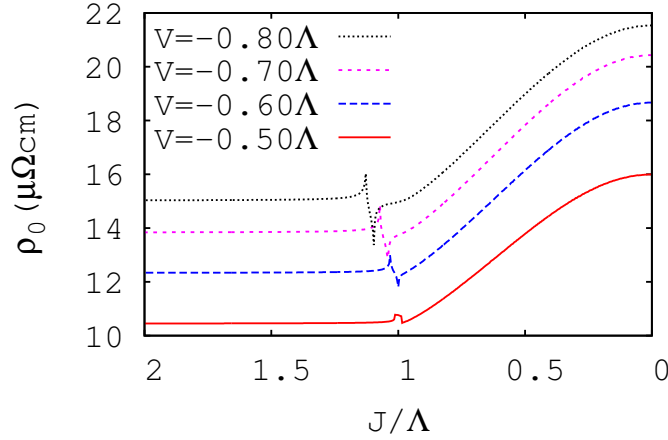
Obr. 6: Vývoj hustoty stavov $N_{\lambda}^0(\varepsilon)$ (čiarkovaná krivka) a lokálnej hustoty stavov v mieste nečistoty $A_{\lambda}(\varepsilon)$ (plná krivka) pre rôzne hodnoty parametra J . Ľavý stĺpec: Majoritný pás \uparrow . Pravý stĺpec: Minoritný pás. \downarrow . $V/\Lambda = -0.43$ a $W/V = 0.2$. Chemický potenciál je vyznačený vertikálnymi čiarkovanými čiarami. Vyšrafovaná plocha reprezentuje obsadenie pásov [M2].

prítomnosť nediagonálnej interakcie W iba slabo ovplyvňuje výsledky, pozri obr. 7. Po prekročení kritickej hodnoty príťažlivého potenciálu $V < V_c \approx -0.489 \Lambda$ vznikajú viazané stavy pod neporušeným kontinuum stavov pre $W = 0$. V lokálnej hustote stavov sa teda objaví delta funkcia. Pre konečné W viazaný stav prejde na rezonanciu Fanovho typu, pretože dochádza k previazaniu s kontinuum majoritného pásu.

Zvyškový odpor sme študovali pomocou Boltzmannovej teórie, pozri obr. 8. Znižovaním parametra J sme pritom modelovali rastúci tlak p aplikovaný na FeGe. Koncentráciu nečistôt sme zvolili $n_{\text{imp}} = 0.01$, čo je rozumná hodnota pre FeGe. Pre $J > J_c$ (t.j. v plne polarizovanej fáze) je odpor zhruba konštantný, no pre $J < J_c$ (t.j. v čiastočne polarizovanej fáze) odpor prudko narastie. Navyše, pre príťažlivé interakcie $V \lesssim V_c$ sa objaví v blízkosti J_c rezonančná anomália odporu, spôsobená rozptylom majoritných elektrónov do rezonančných stavov minoritného pásu. Dostali sme tak kvalitatívnu zhodu s experimentom, pozri obr. 6. Ďalšie detaily čitateľ nájde v práci [M2].



Obr. 7: Lokálna hustota stavov minoritného pásu $A_{\downarrow}(\epsilon)$ v mieste nečistoty pre $J = J_c = \Lambda$. Ľavý stĺpec: $W = 0$. Pravý stĺpec $W/V = 0.2$ [M2].



Obr. 8: Závislosť zvyškového odporu ρ_0 od výmennej interakcie J . $W/V=0.05$ [M2].

3. Fáza spinového řadu v modifikovanom XY modeli

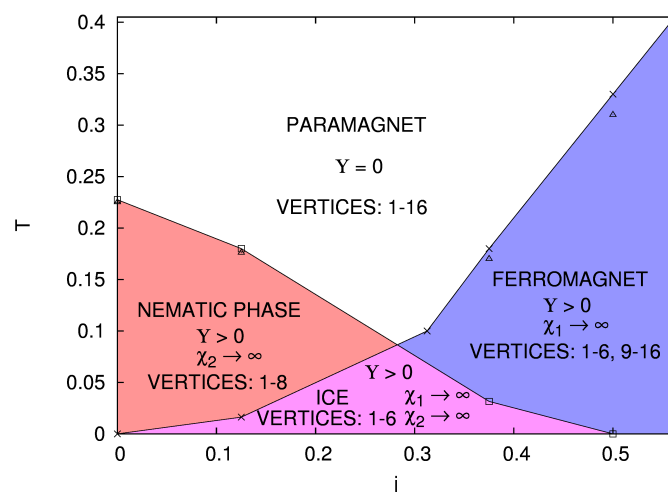
V práci [M3] sme študovali modifikovaný XY model na štvorcovej mriežke definovaný nasledovným hamiltoniánom:

$$H = -j \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) + \frac{1-j}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \cos(2\theta_i - 2\theta_j), \quad j \in \langle 0, 1 \rangle, \quad (5)$$

s periodickými okrajovými podmienkami. V každom bode mriežky sedí klasický spin, ktorý zvierá s osou x uhol θ meraný proti smeru hodinových ručičiek. Interagujú len susedné spiny. Počet mriežkových bodov je N^2 . Prvý člen hamiltoniánu je minimalizovaný pre rovnobežné usporiadanie spinov, preto ho voláme feromagnetický. Druhý člen hamiltoniánu je minimalizovaný pre usporiadanie, v ktorom sú všetky susedné spiny navzájom kolmé a z historických dôvodov ho nazývame “nematický”.

Model sme študovali pomocou Monte Carlo simulácii, konkrétne Wolffovým algoritmom [22]. Sila tohto algoritmu spočíva v preklápaní celého klastra spinov, na rozdiel od Metropolisovho algoritmu, ktorý v jednom kroku preklápa iba jeden náhodne zvolený spin. Keďže podľa Hohenbergovej-Merminovej-Wagnerovej vety [9] XY model pri konečnej teplote nevykazuje žiadnu magnetizáciu, skúmali sme iba magnetickú susceptibilitu χ_1 , ktorá meria “tendenciu” voči feromagnetickému usporiadaniu a nematickú susceptibilitu χ_2 , ktorá meria “tendenciu” voči nematickému usporiadaniu. Okrem toho, sme skúmali aj citlivosť voľnej energie na vhodne zvolenú okrajovú podmienku, tzv. zovšeobecnenú tuhosť (helicitu) Υ . V XY modeli môžeme túto podmienku zvoliť infinitezimálnym pootočením spinov na okraji.

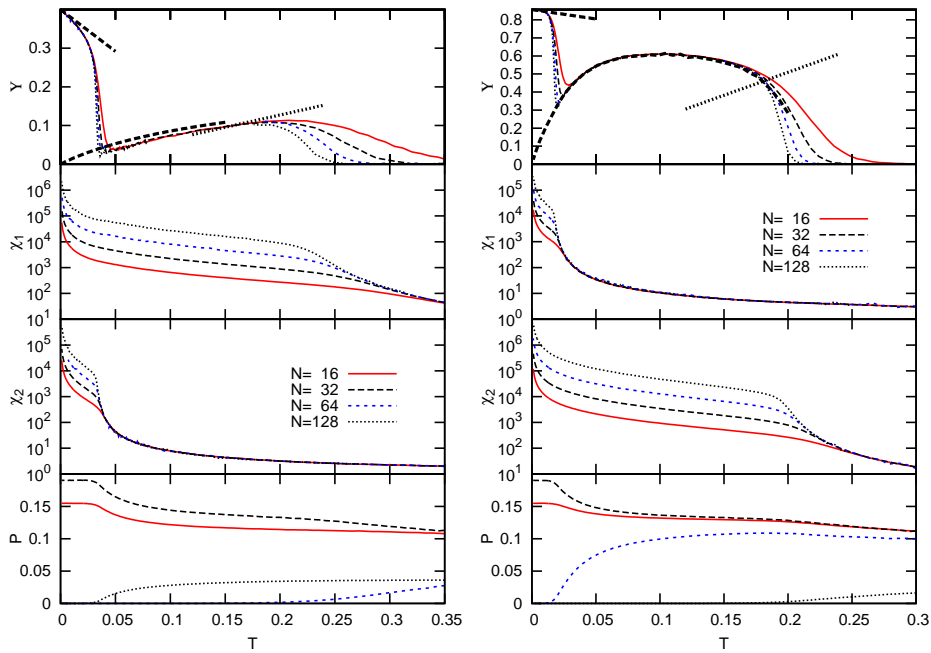
V práci [M3] sme našli fázový diagram obr. 9, ktorý pozostáva zo 4 fáz. Jednotlivé fázy sme rozlíšili pomocou magnetickej susceptibility χ_1 a nematickej susceptibility χ_2 . Oblasť, kde nediverguje ani jedna zo susceptibilit, je paramagnetická fáza. V tejto fáze je tuhosť Υ nulová. Spiny sú teda neusporiadané. V oblasti, kde je tuhosť Υ konečná, máme 3 rôzne fázy s rôznym usporiadaním spinov. Magnetická fáza je oblasť, v ktorej diverguje iba magnetická susceptibilita χ_1 . Nematická fáza je oblasť, v ktorej diverguje iba nematická susceptibilita χ_2 . Napokon, magneticko-nematická fáza je oblasť, v ktorej divergujú obe susceptibility χ_1 a χ_2 . Na obr. 10 sú znázornené pozorovateľné veličiny pre reprezentatívne hodnoty parametra j . Pre



Obr. 9: Fázový diagram modifikovaného modelu (5) [M3].

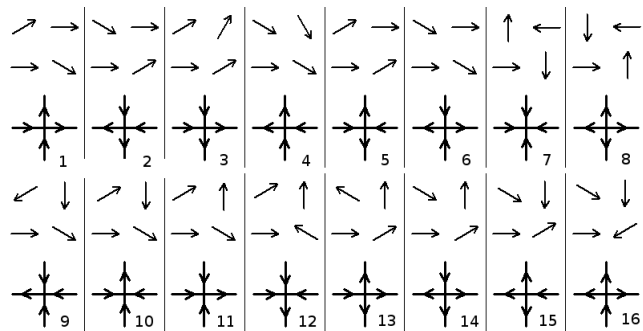
$j = 3/8$, vidíme, že pri zvyšovaní teploty systém prechádza z magneticko-nematickej fázy do paramagnetickej fázy cez feromagnetickú fázu. Na druhej strane, pre $j = 1/8$, systém prechá-

dza z magneticko-nematickej fázy do paramagnetickej fázy cez nematickú fázu.



Obr. 10: Teplotné závislosti pozorovateľných pre rôzne hodnoty parametra $j = 3/8$ (vľavo) a $j = 1/8$ (vpravo). (Z vrchu nahor) Zovšeobecnená tuhosť, magnetická susceptibilita a nematická susceptibilita. $N = 16, 32, 64, 128$. Spodný panel: Koncentrácie vertexov z vrchu nahor postupne (5,6), (1,2,3,4), (9-16 vľavo 7,8 vpravo), (7,8 vľavo 9,16 vpravo). $N = 32$. [M3].

Jedno z kľúčových pozorovaní práce [M3] je, že každej štvorici navzájom susediacich spinov ležiacich vo vrchoch štvorca spojitého XY modelu môžeme priradiť vertex. Idúc okolo štvorca susediacich spinov v proti smere hodinových ručičiek, môže byť rozdiel uhlov susedných spinov kladný alebo záporný. V prípade, že je rozdiel uhlov susedných spinov kladný, priradili sme šípku vertexa von z jeho stredu, v opačnom prípade šípka smeruje do stredu vertexa. Linky sú štyri, každá linka má 2 možnosti, spolu je to teda 16 rôznych vertexov, obr. 11.



Obr. 11: 16 možných konfigurácií spinov v štvorcovej bunke a ich priradenie k 16-tim vertexom. Vertexy 1 až 6 majú signatúru (2,2) t.j. 2 šípky smerujú vždy do vrcholu a dve z vrcholu. Vertexy 7,8 sú typu (4,0) a (0,4) a vertexy 9 až 16 typu (3,1) a (1,3).

Všimli sme si, že základný stav degenerovanej fázy pri $T = 0$, kde diverguje magnetická aj nematická susceptibilita ($0 < j < \frac{1}{2}$), odpovedá diskretnému 6-vertexovému modelu, t.j. existuje bijektívne zobrazenie medzi 6-vertexovým modelom a základným stavom nášho modelu. Naozaj: Susedné spiny môžu v tejto oblasti parametra j zvierat iba uhol $\pm\theta$, kde $0 < \theta(j) < \frac{\pi}{2}$. To ale znamená, že každá štvorica susediacich spinov ležiacich vo vrcholov štvorca, patrí iba do jednej zo 6-tich možných spinových konfigurácií, obr. 11 (vertexy 1 až 6). 6-vertexový model je známy aj ako model ľadu.

Na druhej strane, základný stav v nematickej fáze, t.j. bod $T = 0$ a $j = 0$ odpovedá 8-vertexovému modelu, t. j. vyskytujú sa tu vertexy 1-8. Susedné spiny v tomto prípade zvierajú uhol $\pm\frac{\pi}{2}$, čo je spolu 8 rôznych konfigurácií.

Motivovaní základnými stavmi sme sa rozhodli merať koncentrácie jednotlivých vertexov aj pri teplotách $T > 0$. Okrem vertexov 1 – 8 sme merali aj vertexy 9 – 16 so signatúrami (3,1) a (1,3). Zistili sme, že každá fáza vo fázovom diagrame je kvalitatívne charakterizovaná počtami vertexov, ktoré sa v nej vyskytujú, pozri obr. 10 (spodný panel). V magneticko-nematickej fáze sa dominantne vyskytujú iba vertexy 6-vertexového modelu, pričom v základnom stave sa príslušné koncentrácie perfektne zhodujú s pravdepodobnosťami určenými pre model ľadu analyticky [23]. V nematickej fáze sú dominantne prítomné vertexy 8-vertexového modelu, v magnetickej fáze vertexy 1 – 6 a 9 – 16 16-vertexového modelu a napokon paramagnetická fáza je charakterizovaná tým, že sa v nej vyskytuje všetkých 16 vertexov. Samotné koncentrácie vertexov však nie sú parametrom usporiadania. V blízkosti všetkých fázových prechodov sa objavujú nové vertexy a zdá sa teda, že situácia je podobná ako pre obyčajný XY model, kedy pod kritickou teplotou sú víry a antivíry viazané a nad kritickou teplotou sú voľné [24]. Úlohu vírov a antivírov hrajú jednotlivé typy vertexov. Ďalšie detaily čitateľ nájde v práci [M3].

Záver

V dizertačnej práci sme opísali výsledky troch prác publikovaných v časopise Physical Review B. Spoločným menovateľom všetkých prác bolo, že sa venovali novým javom v systémoch interagujúcich elektrónov a v spinových systémoch. V nasledujúcom výklade stručne zhrnieme dosiahnuté výsledky a naznačíme, akým smerom by sa mohol uberať ďalší výskum. Kvôli prehľadnosti sa budeme jednotlivým prácam venovať oddelene.

(1) V práci [M1] sme prezentovali výsledky štúdia minimálneho modelu v priblížení stredného poľa pri konečnej teplote $T > 0$. Ukázali sme, že pre parametre modelu zvolené v [6] existujú iba dve termodynamické fázy: paramagnetická fáza s nulovou magnetizáciou a feromagnetická s konečnou magnetizáciou. Drudeho váha a stlačiteľnosť je konečná v celom fázovom diagrame 2 okrem paramagnetickej fázy pri teplote $T = 0$, ktorá je izolujúca. Teplotná závislosť susceptibility χ je v paramagnetickej fáze v tesnej blízkosti U_c v kvalitatívnej zhode s experimentálnymi meraniami v zlúčenine FeSi[2]. Anomálne teplotné vlastnosti optickej vodivosti sa opäť kvalitatívne zhodujú s výsledkami meranými v experimente[18, 19]. Podobne aj magnetizačné

krivky vo feromagnetickej fáze v blízkosti U_N sú kvalitatívne konzistentné s experimentom vo $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ [1].

Metóda stredného poľa, ktorou sme analyzovali globálny fázový diagram minimálneho modelu pri konečných teplotách, nám dáva iba najhrubšiu predstavu o možných súťažiacich fázach a o fázovom diagrame. Obzvlášť dôležité je zahrnutie korelácií do popisu magnetickej kovovej fázy, pretože je známe, že teória stredného poľa nadhodnocuje tendenciu k spontánnemu narušeniu symetrie. Mohlo by sa teda stať, že to, čo v teórii stredného poľa vyzerá ako prechod medzi paramagnetickým izolantom a feromagnetickým kovom, je v skutočnosti nemagnetický prechod. Navyiac v práci [M1] a v prácach [6, 8] bol prechod medzi nemagnetickým izolantom a magnetickým kovom v zliatinách $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ modelovaný homogénnou zmenou parametrov $t(x)$ a $\Delta(x)$ pri zmene koncentrácie x . Realistickejšie by bolo samozrejme skúmať neusporiadaný systém, v ktorom jednotlivé body mriežky sú náhodne obsadzované atómami Si a Ge. Homogénnu zmenu $\Delta(x)$ je zrejme možné ponechať, ale namiesto homogénnej funkcie $t(x)$ bude treba zaviesť náhodne rozmiestnené preskokové integrály medzi atómami železa, podľa toho, či sa medzi nimi nachádzajú atómy Si alebo Ge.

(2) V práci [M2] sme skúmali zvyškový odpor v špirálovitých magnetoch pomocou štandardnej Boltzmannovej teórie. Vychádzali sme z predpokladu, že zvyšovanie tlaku p môžeme v našom modeli simulovať znížením výmennej interakcie J , a preto pri kritickom tlaku p_c dochádza k postupnému zaplňaniu minoritného pásu. Ukázali sme, že v okolí kritickej hodnoty výmennej interakcie J_c vykazuje zvyškový odpor ρ_0 ostrý nárast, spôsobený prechodom plne polarizovaného stavu do čiastočne polarizovaného stavu. Navyiac, v prípade, že diagonálne zložky defektného potenciálu sú príťažlivé a dostatočne silné, zvyškový odpor vykazuje rezonančnú anomáliu v blízkosti J_c . Takéto správanie zvyškového odporu namerali autori práce[7] vo FeGe pri aplikovaní kritickeho tlaku $p_c \approx 19$ GPa.

Treba zdôrazniť, že náš výpočet nie je možné aplikovať na zvyškový odpor systému zliatin $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ pri znižovaní parametra x , pretože sa v tomto prípade jedná o silne neusporiadaný systém s vysokou koncentráciou defektov. Stojí tiež za mienku, že v [M2] iba naznačujeme, ako by sme mohli vysvetliť teplotnú závislosť odporu nameranú v experimentálnej práci[7]. Táto zaujímavá otázka však stále ostáva otvorenou.

(3) V práci [M3] sme preskúmali fázový diagram modifikovaného XY modelu na štvorcovej mriežke s frustrovanými nematickými interakciami. Ukázali sme, že fázový diagram pozostáva okrem paramagnetickej, feromagnetickkej a nematickej fázy aj z magneticko-nematickej fázy, t.j. fázy, v ktorej diverguje tak magnetická ako aj nematická susceptibilita. V paramagnetickej fáze je tuhosť nulová, jedná sa teda o "plynnú fázu", ostatné fázy majú konečnú tuhosť.

Jedným z najzaujímavejších pozorovaní je, že každej spojitej konfigurácii spinov vieme jednoznačne priradiť vertexy z diskrétného 16-vertexového modelu. Každá fáza je charakterizovaná dominantným výskytom iba niektorých typov vertexov, hoci samotné koncentrácie vertexov nie sú parametrami usporiadania. Základný stav magneticko-nematickej fázy odpovedá 6-vertexovému modelu, ktorý je známy ako model ľadu. Zo škálovacej analýzy oboch suscepti-

bilít a tepelnej kapacity sme zistili, že všetky fázové prechody sú Kosterlitzovho-Thoulessovho typu, naviac každý prechod je charakterizovaný konečným skokom tuhosti, hoci kritické expo-
nenty susceptibilít a veľkosti skoku tuhosti nie sú univerzálne.

Jednou z otvorených otázok je, či existuje prirodzená susceptibilita, ktorá by divergovala iba vo fáze ľadu. Veríme, že fázové prechody možno interpretovať pomocou korelačných funkcií príslušných vertexov, ale tieto veličiny sme zatiaľ neštudovali. Naviac, hoci tuhosť pri fázovom prechode z fázy ľadu do nematickej ako aj magnetickej fázy vykazuje konečný skok, v bode prechodu je tuhosť oboch fáz konečná, čo je v spore s univerzálnym KT prechodom. Ucelený teoretický obraz pre fázový diagram modifikovaného XY modelu s frustrovanou nematickou interakciou teda v súčasnosti zatiaľ nie je k dispozícii.

English Summary

This thesis presents an annotated set of three articles, that I co-published with my supervisor in Physical Review during my PhD study. These papers dealt with the following topics:

(1) Electrical and magnetic properties of the compound $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$:

The compound $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ is known for its unconventional magnetically induced metal-insulator transition. Recently a minimal theoretical model was proposed that explains these peculiar properties in the limit of zero temperature. In this work we explore the predictions of the minimal model in the mean field approximation at finite temperatures. We show that our results are in qualitative agreement with many experiments carried out for $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$.

(2) Residual resistivity of the alloy FeGe under pressure:

Residual resistivity of the alloy FeGe exhibits an anomaly in the vicinity of the critical pressure $p_c \approx 19$ GPa, whose origin was unknown until now. This anomaly was recently interpreted by suggesting that a minority-spin band starts to become populated at pressures higher than p_c . In this work we explore this hypothesis by using the semiclassical Boltzmann theory and the T -matrix treatment of scattering on dilute point defects.

(3) Study of the modified XY model:

Phase diagram of the modified XY model on the square lattice with magnetic and nematic interactions of classical spins consists of 4 phases: paramagnetic, ferromagnetic, nematic and magnetic-nematic phase. In this work we study the properties of the individual phases and the mechanism of phase transitions between them.

Zoznam prác tvoriacich dizertáciu

- [M1] M. Dian and R. Hlubina
Minimal model of the magnetically induced metal-insulator transition: Finite-temperature properties
Phys. Rev. B **89** 155127 (2014).
- [M2] M. Dian and R. Hlubina
Residual resistivity of FeGe under pressure
Phys. Rev. B **88** 165125 (2013).
- [M3] M. Dian and R. Hlubina
Spin-ice phase in a modified XY model
Phys. Rev. B **84** 224420 (2011).

Literatúra

- [1] S. Yeo, S. Nakatsuji, A. D. Bianchi, P. Schlottmann, Z. Fisk, L. Balicas, P. A. Stampe, and R. J. Kennedy, Phys. Rev. Lett. **91**, 046401 (2003).
- [2] V. Jaccarino, G. K. Wertheim, J. H. Wernick, L. R. Walker and S. Arajs, Phys. Rev. **160**, 476 (1967).
- [3] R. Wäppling and L. Häggström, Phys. Lett. A **28**, 173 (1968).
- [4] L. Lundgren, K. A. Blom, and O. Beckman, Phys. Lett. A **28**, 175 (1968).
- [5] V. I. Anisimov, R. Hlubina, M. A. Korotin, V. V. Mazurenko, T. M. Rice, A. O. Shorikov, and M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. **89**, 257203 (2002).
- [6] D. Plencner and R. Hlubina, Phys. Rev. B **79**, 115106 (2009).
- [7] P. Pedrazzini, H. Wilhelm, D. Jaccard, T. Jarlborg, M. Schmidt, M. Hanfland, L. Akselrud, H. Q. Yuan, U. Schwarz, Yu. Grin, and F. Steglich, Phys. Rev. Lett. **98**, 047204 (2007).
- [8] J. Imriška and R. Hlubina, Phys. Rev. B **84** 195144 (2011).
- [9] N. D. Mermin, J. Math. Physics **8**, 1061 (1967).
- [10] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
- [11] D. H. Lee and G. Grinstein, Phys. Rev. Lett. **55**, 541 (1985).
- [12] S. E. Korshunov, JETP Lett. **41**, 263 (1985).

- [13] J. Imriška, *Phase diagram of modified XY model*, FMFI UK, (2009).
<http://stella.uniba.sk/zkp-storage/dzb/dostupne/FM/2009/2009-FM-iU0vAm/>
- [14] D. H. Lee, G. Grinstein and J. Toner, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2318 (1986).
- [15] M. Dian, *Štúdium modifikovaného XY modelu na štvorcovej mriežke*, FMFI UK, (2010).
<https://stella.uniba.sk/zkp-storage/ddp/dostupne/FM/2010/2010-FM-inCx1Y/>
- [16] D. Vollhardt, N. Blümer, K. Held, M. Kollar, J. Schlipf, and M. Ulmke, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **103**, 283 (1997).
- [17] Th. Hanisch, G. S. Uhrig, and E. Müller-Hartmann, *Phys. Rev. B* **56**, 13960 (1997).
- [18] D. Menzel, P. Popovich, N. N. Kovaleva, J. Schoenes, K. Doll, and A. V. Boris, *Phys. Rev. B* **79** 165111 (2009).
- [19] Z. Schlesinger, Z. Fisk, Hai-Tao Zhang, M. B. Maple, J. F. DiTusa, and G. Aeppli, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1748 (1993).
- [20] B. Lebech, J. Bernhard, and T. Freltoft, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 6105 (1989).
- [21] G. Rickayzen, *Green's Functions and Condensed Matter*, Academic Press 1980.
- [22] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
- [23] E. H. Lieb and Wu, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and M. S. Green (Academic Press, London, 1972), Vol. 1, p. 450.
- [24] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).