



Pozvánka na seminár Oddelenia teoretickej fyziky ÚEF SAV, v. v. i.



streda, 04. marec 2026 o 11:00

Budova PROMATECH (m.č. 108), Watsonova 47A, Košice

Silné korelácie a frustrácia:

Od fermiónov na trojuholníkovej mriežke k molekulárnym magnetom

Prednášajúca:

RNDr. Ľubomíra Regeciová, PhD.

Oddelenie teoretickej fyziky ÚEF SAV, v. v. i.
regeciova@saske.sk

Anotácia:

Silne korelované systémy a frustrácia predstavujú prirodzené prostredie pre vznik netriviálnych magnetických a termodynamických javov. V našich nedávnych prácach sme sa zamerali na dve komplementárne realizácie takýchto systémov: lokalizovaných fermiónov na trojuholníkovej mriežke a konečné kvantové klastre reprezentujúce molekulárne magnety. Monte Carlo simulácie fermiónového modelu s lokálnou hubbardovskou interakciou a isingovskou najbližšou výmennou interakciou ukazujú, že kombinácia geometrickej frustrácie a elektrónových korelácií vedie k zásadne odlišnému správaniu pre feromagnetickú a antiferomagnetickú interakciu. Na rozdiel od teórie stredného poľa, ktorá predpovedá kvalitatívne podobné správanie v oboch prípadoch, numerické simulácie odhaľujú výrazné potlačenie d'alekodosahového usporiadania v antiferomagnetickom prípade a zmeny charakteru fázových prechodov v dôsledku fluktuácií. V druhej časti analyzujeme vplyv veľkosti klastra, geometrie a interakcií na magnetokalorické chladenie. V spinovom Heisenbergovom modeli sa najsilnejší chladiaci efekt objavuje v Isingovej limite a pre malé klastre, zatiaľ čo v Hubbardovom modeli je rozhodujúca rovnováha medzi lokalizáciou a itineranciou elektrónov a optimálny režim sa nachádza pri stredných hodnotách interakcie elektrónov. Takýto systematický prístup otvára cestu k dizajnu reálnych materiálov s optimalizovanými magnetokalorickými vlastnosťami.