

## Formulár ZK - Záverečná karta projektu

Riešiteľ: RNDr. Pavol Farkašovský, CSc.

Evidenčné číslo projektu: LPP-0047-06

Názov projektu: Štúdium silne korelovaných elektrónových systémov za hranicami štandardných priblížení

Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:

Ústav Experimentálnej Fyziky, SAV, Košice

Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):

Udelené patenty alebo podané patentové

Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky

1, Žonda M, Farkašovský P, Čenčariková H, Solid state communications **149**, 1997-2001 (2009)

2, Čenčariková H, Farkašovský P, Žonda M, Int. J. Mod. Phys. B **22**, 2473-2487 (2008)

3, Farkašovský P, Phys. Rev. B **77**, 155130 (2008)

4, Farkašovský P, EPL **84**, 37010 (2008)

5, Čenčariková H, Farkašovský P, phys. stat. sol. b **244**, 1900-1907 (2007)

V čom vidíte uplatnenie výsledkov projektu:

Nami rozpracované numerické metódy, vďaka svojej vysokej flexibilitě, môžu byť použité pri ďalšom štúdiu silne korelovaných systémov, ale sú ľahko aplikovateľné aj na podobné problémy teoretickej fyziky. Získané výsledky a metódy budú využité v rámci výučby na VŠ.

## Charakteristika výsledkov

### Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

Ciele projektu boli v plnom rozsahu splnené. Najdôležitejšie výsledky dosiahnuté pri našom teoretickom štúdiu vplyvu neideálnosti mriežky na vlastnosti základného stavu a termodynamiku silne korelovaných systémov sú sumarizované nižšie:

- Zistili sme, že geometria trojuholníkovej mriežky naruší symetriu fázového diagramu (FD) rovnako tak aj valenčných prechodov (v porovnaní so štvorcovou mriežkou), a stabilizuje nové typy nábojových usporiadaní – axiálne čiarové usporiadania a fázovo separované distribúcie  $f$ -elektrónov.
- Rozpracovali sme novú numerickú metódu na popis vlastností základného stavu (ZS) asymetrického Hubbardovho modelu. Použitím tejto metódy boli skonštruované úplné FD-my modelu v jedno a dvojrozmernom prípade.
- Použitím Hartreeho-Fockovej aproximácie s nestabilitou nábojovej hustoty sme popísali feroelektrický ZS so spontánu polarizáciou v dvoj a trojrozmernom modeli Falicova-Kimballa (FK) s  $f$ - $f$  elektrónovým skákaním.
- Ukázali sme, že mriežkové defekty (vakancie) majú silný vplyv na vlastnosti ZS v bezspinovom modeli FK (generujúci model pre popis interagujúcich  $d$  a  $f$  elektrónových systémov). Konkrétne, sme ukázali, že za prítomnosti vakancií (distribuovaných náhodne) ZS modelu je vždy fázovo separovaný pre malé  $f$ -elektrónové koncentrácie  $n_f$  a vykazuje d'alekodosahové usporiadanie pre  $n_f$  blízke do polovice zaplnenému prípadu  $n_f=1/2$ .
- Ukázali sme, že ZS FD ako aj obraz valenčných prechodov a prechodov kov-izolátor nájdený pre konvenčný model FK je výrazne narušený zahrnutím nelokálnej Coulombovskej interakcie. Napríklad sme našli, že model vykazuje prechody kov-izolátor indukované nelokálnou Coulombovskou interakciou tak pre slabé ako aj stredne silné interakcie.
- Zistili sme, že pre trojrozmerný model FK fázový prechod z nízkoteplotnej usporiadanej fázy do vysokoteplotnej neusporiadanej fázy, indukovaný teplotou, je fázovým prechodom prvého druhu pre Coulombovské intrakcie  $U < 4$  a fázovým prechodom druhého druhu pre  $U > 4$ .
- Predpovedali sme nové kvantové fázy (koexistujúcu kovovú a izolátorovú fázu, „atomic-density-wave“ fázu) vo fermiónových zmesiach s veľkým rozdielom hmotností atómov na optických mriežkach.

### Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

The project goals have been fulfilled in full scale. The most important results reached in our theoretical study of lattice imperfections on ground-state and thermodynamic properties of strongly correlated systems are summarized below:

- We have found that the triangular lattice destroys the symmetry of the phase diagram (PD) as well as the valence transitions (in comparison to square lattice), and stabilizes the new types of spatial charge ordering - the axial stripes and the phase separated distributions of localized  $f$ -electrons.
- We have elaborated a new numerical method for a description of the ground-state (GS) properties of the asymmetric Hubbard model. Using this method the comprehensive PDs of the model in one and two dimensions were constructed.
- Using Hartree-Fock approximation with charge-density-wave instability we have described the ferroelectric GS with spontaneous polarization in the two and three dimensional Falicov-Kimball model (FKM) with  $f$ - $f$  hopping.
- We have found that the lattice defects (vacancies) have strong effects on the GS properties of the spinless FKM (a generating model for description of coupled  $d$  and  $f$  electron systems). In particular, we have found that in the presence of vacancies (distributed randomly) the GS of the model are phase separated for small  $f$ -electron concentrations  $n_f$  and exhibit the long-range order for  $n_f$  near the half-filled band case  $n_f=1/2$ .
- We have shown that the GS PD as well as the picture of valence and metal-insulator transitions found for the conventional FKM are strongly changed when the nonlocal Coulomb interaction is added. For example, we have found that the model exhibits the nonlocal Coulomb interaction induced insulator-metal transition in the weak and intermediate coupling limit.
- We have found that in the three dimensional FKM the phase transition from the low-temperature ordered phase to the high-temperature disordered phase induced by temperature is the first order phase transition for the Coulomb interaction  $U < 4$  and the second order phase transition for  $U > 4$ .
- We have predicted new quantum phases (coexisting metalling and insulating phases, the atomic-density-wave phases) in fermionic mixtures with strong mass imbalance on optical lattices.

**Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas so zverejnením údajov v nej uvedených.**

Podpis zodp. riešiteľa: .....

Dátum: .....

Podpis štatutárneho zástupcu: .....

Pečiatka: