

TEORETICKÁ FYZIKA

Mikroskopické odôvodnenie stochastických hydrodynamických rovníc pre fermi-systémy

školiťel: prof. Dr.h.c. RNDr. Michal Hnatič, DrSc.

konzultant: RNDr. Tomáš Lučivjanský, PhD.

forma štúdia: denná

Anotácia: V modernej štatistickej mechanike sa intenzívne používa metóda Greenovch funkcií, avšak v rámci mikroskopického prístupu sa touto metódou väčšinou skúmajú len statické termodynamické charakteristiky (kritické indexy, stavové rovnice a pod.). V prípade dynamických úloh štandardný prístup spočíva v odvodení fenomenologických stochastických rovníc Langevinovho typu s náhodnou Gaussovou silou. Mikroskopické zdôvodnenie takéhoto typu rovníc je aktuálnou úlohou štatistickej fyziky. Existuje robustný Keldyshov-Schwingerov algoritmus, ktorý v rámci mikroskopického popisu umožňuje jednotný prístup pri štúdiu statických a dynamických vlastnosti systému. Dizertačná práca sa bude zaoberať štúdiom mnohočasticových kvantových systémov metódami kvantovej teórie poľa. Hlavná pozornosť bude venovaná skúmaniu mikroskopických analógií hydrodynamických stochastických rovníc pre mnohočasticové fermi-systémy pomocou metódy časových Greenových funkcií pri konečnej teplote (Keldyshov-Schwingerov algoritmus).

Literatúra:

N. Vasil'ev, The Field Theoretic Renormalization Group in Critical Behavior Theory and Stochastic Dynamics, Boca Raton:Chapman & Hall/CRC (2004).

L.V. Keldysh, Diagram technique for nonequilibrium processes, Sov. Phys. JETP, 20 (1965), 1018, [Zh.Eksp. Theor. Fiz. 47, 1515 (1964)].

Julian Schwinger, Brownian Motion of a Quantum Oscillator, Journal of Mathematical Physics, 2;3 (1961), 407-432.

J. Honkonen, M.V. Komarova, Yu.G. Molotkov, M.Yu. Nalimov, Effective large-scale model of boson gas from microscopic theory, Nuclear Physics B, 939 (2019), 105-129.

Teoretické štúdium skyrmionových stavov v geometricky frustrovaných antiferomagnetikách.

školiťel: prof. RNDr. Milan Žukovič, PhD.

forma štúdia: denná

Anotácia: Antisymetrická spinová výmenná interakcia typu Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) môže viesť k vzniku skrútených magnetických štruktúr. Tieto vzbudili veľký záujem najmä po experimentálnom pozorovaní netriviálnych magnetických konfigurácií, nazývaných magnetické skyrmionové mriežky, ktoré majú potenciálne technologické aplikácie [1]. Vo feromagnetických (FM) systémoch vzniká skyrmionová fáza z konkurencie medzi FM interakciami a DMI a je stabilizovaná magnetickým poľom a tepelnými fluktuáciami. Podobná antiferomagnetická (AFM) skyrmionová fáza bola objavená vo frustrovanom klasickom Heisenbergovom AFM na trojuholníkovej mriežke v poli a to nielen s DMI [2], ale aj bez DMI v dôsledku interakcií medzi ďalšími susedmi [3]. Ukázalo sa, že magnetická frustrácia môže zlepšiť stabilitu skyrmionovej fázy [4] a že použitie AFM v zariadeniach založených na skyrmionoch má určité výhody oproti implementácii FM [5]. Cieľom navrhovaného výskumu je teoretické hľadanie a štúdium vhodných kandidátov medzi geometricky frustrovanými AFM, ktoré by vykazovali skyrmionové fázy s fyzikálne a technologicky zaujímavými vlastnosťami.

Literatúra:

N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, J. E. Bickel, B. Wolter, K. von Bergmann, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger, *Science* 341, 636 (2013).
H. D. Rosales, D. C. Cabra, and Pierre Pujol, *Phys. Rev. B* 92, 214439 (2015).
T. Okubo, S. Chung and H. Kawamura, *Phys. Rev. Lett.* 108, 017206 (2012).
H. Y. Yuan, O. Gomonay, and Mathias Kläui, *Phys. Rev. B* 96, 134415 (2017).
J. Barker, O. A. Tretiakov, *Phys. Rev. Lett.* 116, 147203 (2016); W. Legrand et al., *Nature materials* 19, 34 (2020).

Zovšeobecné XY modely a ich využitie v predikcii priestorových dát.

školiteľ: prof. RNDr. Milan Žukovič, PhD.

forma štúdia: denná

Anotácia: Ukazuje sa, že XY model, zovšeobecný pridaním členov vyšších rádov do Hamiltoniánu, môže vykazovať bohaté kritické správanie s množstvom zaujímavých fáz [1]. Komplexnosť a nepredvídateľnosť pozorovaných fáz narastá prítomnosťou ďalších efektov, akými sú geometrická frustrácia a súťaženie rôznych typov interakcií [2]. Cieľom prvej časti výskumu je študovať vplyv frustrácie v dôsledku súťaženia členov vyšších rádov na kritické správanie zovšeobecného XY modelu. Druhá časť výskumu bude venovaná využitiu vhodne definovaných zovšeobecných XY modelov na predikciu chýbajúcich hodnôt v masívnych priestorových dátach, napr. z diaľkového snímania Zeme. Tradičné predikčné metódy nie sú vhodné pre takéto dáta najmä kvôli vysokej výpočtovej zložitosti ako aj iným obmedzeniam [3]. Navrhovaný výskum si kladie za cieľ vyvinúť stratégie pre vývoj efektívnych predikčných metód, ktoré by boli flexibilné a vhodné pre automatické spracovanie s využitím masívne paralelných algoritmov implementovaných na grafických procesoroch (GPU) [4].

Literatúra:

F. C. Poderoso, J. J. Arenzon, and Y. Levin, *Phys. Rev. Lett.* 106, 067202 (2011).
M. Lach and M. Žukovič, *Phys. Rev. E* 104, 024134 (2021).
N. Cressie and C.K. Wikle, *Statistics for spatio-temporal data*. John Wiley & Sons, 2015.
M. Žukovič, M. Borovský, M. Lach and D.T. Hristopulos, GPU-Accelerated Simulation of Massive Spatial Data Based on the Modified Planar Rotator Model, *Mathematical Geosciences* 52 123 (2020).

Viazané magnóny ako dôsledok deštruktívnej kvantovej interferencie frustrovaných Heisenbergových a Hubbardových modelov.

školiteľ: doc. RNDr. Jozef Strečka, PhD.

forma štúdia: denná

Anotácia: Geometrická spinová frustrácia kvantových Heisenbergových a Hubbardových modelov môže za určitých okolností viesť k vzniku nezvyčajných viazaných kvantových stavov známych ako lokalizované magnóny. Dizertačná práca bude venovaná teoretickému štúdiu vybraných frustrovaných kvantových Heisenbergových a Hubbardových modelov, ktorých nízкотеплотné správanie vďaka viazaným stavom s charakterom lokalizovaných magnónov možno opísať klasickými modelmi mriežkových plynov.

Literatúra:

1. O. Derzhko, J. Richter, Universal low-temperature behavior of frustrated quantum antiferromagnets in the vicinity of the saturation field, *European Physical Journal B* 52 (2006) 23–36.

2. O. Derzhko, J. Richter, M. Maksymenko, Strongly correlated flat-band systems: The route from Heisenberg spins to Hubbard electrons, International Journal of Modern Physics B 29 (2015) 1530007.

Kvantové a teplotné fázové prechody nízkorozmerných spinových systémov.

školiteľ: doc. RNDr. Jozef Strečka, PhD.

forma štúdia: denná

Anotácia: Klasické a kvantové spinové systémy môžu vykazovať anomálne magnetické správanie v blízkom okolí teplotných a kvantových fázových prechodov. Hlavným cieľom dizertačnej práce je preštudovať správanie sa základných magnetických veličín (magnetizácia, magnetická susceptibilita a tepelná kapacita) vybraných nízkorozmerných Isingových-Heisenbergových a Heisenbergových spinových modelov v tesnej blízkosti teplotných a kvantových fázových prechodov. Dôraz bude kladený na magnetickým poľom a tlakom riadené kvantové fázové prechody ako aj na teplotné fázové prechody, ktoré sa môžu objaviť v dvojrozmerných Isingových-Heisenbergových a Heisenbergových spinových modeloch v prítomnosti vonkajšieho magnetického poľa.

Literatúra:

1. J. Stapmanns, P. Corboz, F. Mila, A. Honecker, B. Normand, S. Wessel, Thermal critical points and quantum critical end point in the frustrated bilayer Heisenberg antiferromagnet, Physical Review Letters 121 (2018) 127201.
2. J. Larrea Jiménez, S. P. G. Crone, E. Fogh, M. E. Zayed, R. Lortz, E. Pomjakushina, K. Conder, A. M. Läuchli, L. Weber, S. Wessel, A. Honecker, B. Normand, Ch. Rüegg, P. Corboz, H. M. Rønnow, F. Mila, A quantum magnetic analogue to the critical point of water, Nature 592 (2021) 370.
3. L. Weber, A. Honecker, B. Normand, P. Corboz, F. Mila, S. Wessel, Quantum Monte Carlo simulations in the trimer basis: first-order transitions and thermal critical points in frustrated trilayer magnets, SciPost Physics 12 (2022) 054.

Spinovo-orbitálny točivý moment vo van der Waalsovských heteroštruktúrach dvojrozmerných materiálov.

školiteľ: RNDr. Martin Gmitra, PhD.

forma štúdia: denná

Anotácia: Spinovo-orbitálna interakcia je na mikroskopickej úrovni interakcia medzi nábojom a spinom elektrónu. V množstve materiálov táto interakcia umožnila návrh nových nanoelektronických zariadení. Spinovo-orbitálny točivý moment otvára potenciál pre návrh novej nízkoenergetickej technológie, pamäťovo stálych elementov alebo logických zariadení využívajúcich prúdom kontrolovaný magnetický stav alebo indukovanú dynamiku. Nedávny objav dvojrozmerných materiálov ponúka jedinečnú príležitosť vytvárať z nich van der Waalsove heteroštruktúry a študovať efekty blízkosti medzi spinovo-orbitálnou interakciou a magnetizmom, a využiť ich vzájomné prepojenie pri návrhu heteroštruktúr s originálnymi vlastnosťami. Existujú dva základné mikroskopické mechanizmy pre vznik spinovo-orbitálneho točivého momentu, spinový Hallov jav a inverzný spinový galvanický efekt, ktoré vedú k členom majúcim tlmiači a polový efekt na točivý moment. Teoretický výskum bude zameraný na výpočty elektrónovej štruktúry z prvých zásad a určenie zodpovedajúcich spinovo-orbitálnych točivých momentov v technologicky relevantných heteroštruktúrach

Literatúra:

- [1] A. Manchon, et al., Review of Modern Physics 91, 035004 (2019).
- [2] K. S. Novoselov et al., Science 353, aac9439 (2016).

[3] F. Freimuth, et al., Phys. Rev. B 90, 174423 (2014).

[4] F. Xue, et al., Phys. Rev. B 102, 014401 (2020).

[5] R. M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge Press, 2004 ISBN 9780521782852.

[6] E. Kaxiras, J. D. Joannopoulos, Quantum Theory of Materials, Cambridge University Press, 2019 ISBN 9781139030809.

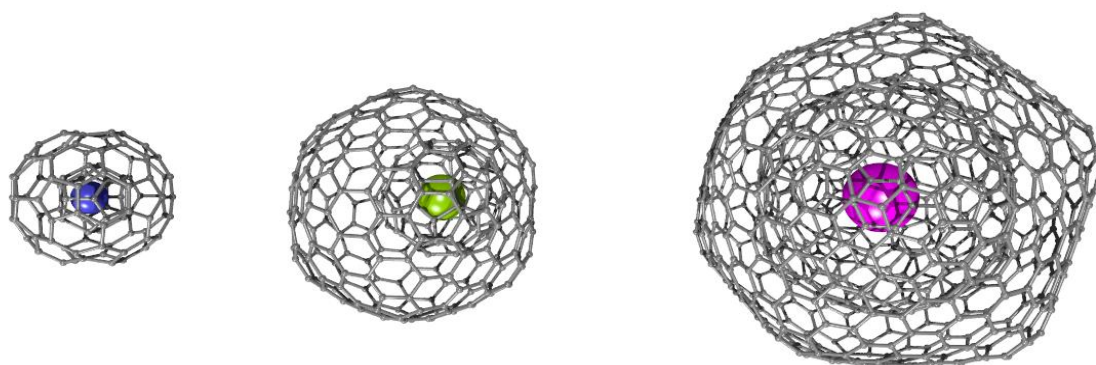
Ústav experimentálnej fyziky SAV Košice

Štúdium elektrónových vlastností grafenových oniónov s reaktívnym atómom vnútri.

školiťel: RNDr. Richard Pinčák, PhD.

forma štúdia: denná, ÚEF SAV Košice

Anotácia: Metódami kvantovej teórie a štatistickej fyziky budú študované rôzne druhy grafenových oniónov. Konkrétne onióny C20@C80, C60@C240 a C240@C540 budú vybrané ako predmety základného štúdia, pretože patria k najstabilnejším oniónom. Ale aj tieto fullerény majú rôzne priemery, náboje a tiež elektrónové vlastnosti, takže na ich príklade môžeme urobiť viac záverov pre onióny s podobným vnútorným a vonkajším plášťom. Jednotlivé reaktívne atómy ako Ni, Fe a Co sú zabudované do vnútra každého z týchto fullerénov (Obrázok 1). Cieľom tohoto štúdia je nájsť nové stabilné oniónové štruktúry s vhodnými elektrónovými vlastnosťami, ktoré vyžaduje nanopriemysel. Základne teórie a prístupy k riešeniu danej témy bez reaktívneho atómu vnútri sú publikované v prácach [1-3].



Obr. 1. Atómová štruktúra oniónov a) C20@C80+Ni; b) C60@C240+Fe; c) C240@C540+Co

Literatúra:

1. R. Pincak, M. Pudlak, Chapter in book Progress in Fullerene Research, with title Electronic structure of spheroidal fullerenes, ed. F. Columbus, Nova Science Publishers, New York, 2007, ISBN: 1-60021-841-5.

2. M. Pudlak and R. Pincak, Energy gap between highest occupied molecular orbital and lowest unoccupied molecular orbital in multiwalled fullerenes, Physical Review A 79 (2009) 033202.

3. Pincak, R., Shunaev, V.V., Smotlacha, J., Slepchenkov, M.M., Glukhova, O.E. Electronic properties of Bilayer Fullerene onions, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 25 (10) 2017 pp. 607-612.