

# Seminar odseka za kompleksne snovi F7

**Petek, 08.09.2017 ob 13:00 uri,  
Seminarska soba F7**

## **Urejanje polaronov v dveh dimenzijah.**

**Jaka Vodeb**

**Fakulteta za matematiko in fiziko in  
Institut »Jožef Stefan«, Ljubljana**

V magistrski nalogi je obravnavano modeliranje nizkotemperaturnih faz kristala  $1T\text{-TaS}_2$  (TAS). V splošnem je za kristal TAS značilen bogat fazni diagram in mikroskopska struktura pojava vala gostote naboja (VGN). Do sedaj je bilo možno mikroskopsko teorijo povprečnega polja, ki se običajno uporablja za opis VGN, uporabiti le za opis faznega prehoda, ki se zgodi pri višjih temperaturah. Glavna ideja magistrske naloge je uporabiti pojav kvazidelca, ki se imenuje polaron, za opis nizkotemperaturnih faz TAS. Predpostavljena interakcija med polaroni temelji na skrajno anizotropni kvazidvodimenzionalni naravi kristala, ki je tudi uporabljena za utemeljitev obravnave samo ene plasti Tantalovih atomov v TAS. Izkaže se, da je možno kvantno mehansko obravnavo kristala poenostaviti na obravnavo klasičnih interagirajočih polaronov na trikotni kristalni rešetki, kar je obravnavano z metodo Monte Carlo in Metropolisovim algoritmom. Primerjave nizkotemperaturnih konfiguracij polaronov z eksperimentalno opaženimi fazami TAS nakazujejo, da je možno fazo s skoraj komenzurabilnim VGN opisati s predlaganim modelom le z dodatkom zunanega polja, ki vsiljuje eksperimentalno opaženo daljnosežno ureditev. Predlagana interakcija med polaroni v ozkem območju prostih parametrov sicer podpira eksperimentalno opaženo ureditev, vendar le ob prisotnosti zunanega polja. Novo odkrite metastabilne faze TAS oziroma tako imenovanega skritega stanja, ki ni prisotno na termodinamičnem faznem diagramu TAS, ni možno opisati z vpeljavo tovrstnega polja. Razlog leži v odsotnosti daljnosežne urejenosti domen, ki je prisotna v primeru faze s skoraj komenzurabilnim VGN. Izkaže se, da tudi z modelom brez zunanega polja, ki sicer podpira naključno urejenost domenske strukture skritega stanja, ni možno popolnoma opisati vseh njegovih značilnosti.

**Predavanje bo v slovenskem jeziku.**

**Vljudno vabljeni.**

