

1996–2016 DWADZIEŚCIA LAT

MINIZYMPOZJUM FIZYKI STATYSTYCZNEJ

XXI MINISYPOZJUM FIZYKI STATYSTYCZNEJ

9 GRUDNIA 2016 r.

Wydział Fizyki

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza
w Poznaniu

Program i streszczenia



Zakład Fizyki Komputerowej <http://pearl.amu.edu.pl>



KOMITET ORGANIZACYJNY

- prof. dr hab. inż. Zbigniew Domański** (Politechnika Częstochowska)
prof. dr hab. Andrzej Drzewiński (Uniwersytet Zielonogórski)
dr hab., prof. UZ Mirosław Dudek (Uniwersytet Zielonogórski)
prof. dr hab. Grzegorz Kamieniarz (Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu)
prof. dr hab. Krzysztof Kulakowski (AGH w Krakowie)
prof. dr hab. Romuald Lemański (INTiBS PAN we Wrocławiu)
prof. dr hab. Józef Sznajd (INTiBS PAN we Wrocławiu)



Lokalny Komitet Organizacyjny

- prof. dr hab. Grzegorz Kamieniarz**, przewodniczący
dr hab. Wojciech Florek, sekretarz
dr Michał Antkowiak
dr Piotr Kozłowski

XXI MINISYMPOZJUM FIZYKI STATYSTYCZNEJ

Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

PROGRAM

Sesja 1 chairman: prof. dr hab. Grzegorz Kamieniarz

- 10:15-11:00 prof. dr hab. Romuald Lemański (INTiBS PAN)
Opis teoretyczny pierścieni molekularnych uwzględniający elektronowe stopnie swobody oraz fluktuacje spinowe jonów magnetycznych
- 11:00-11:15 mgr inż. Jacek Matysiak (INTiBS PAN)
Własności pierścienia molekularnego Cr₈ otrzymane w oparciu o model uwzględniający elektronowe stopnie swobody i fluktuacje spinowe jonów magnetycznych
- 11:15-11:30 mgr inż. Jakub Krawczyk (INTiBS PAN)
Anomalne własności termodynamiczne modelu Falicova-Kimballa przy małych wartościach parametru oddziaływania
- 11:30-11:45 dr hab. Franco Ferrari, prof. US (Instytut Fizyki, US)
Zastosowanie metody Monte Carlo Wanga-Landaua do modelowania własności termicznych i mechanicznych pojedynczych pierścieni polimerowych w roztworze

Sesja 2 chairman: prof. dr hab. Andrzej Drzewiński

- 12:00-12:45 dr inż. Artur P. Durajski (Instytut Fizyki, PCz)
Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe w świetle najnowszych wyników teoretycznych i doświadczalnych
- 12:45-13:00 dr inż. Marcin Jarosik (Instytut Fizyki, PCz)
Dynamika molekuly wodoru z zewnętrznym wymuszeniem
- 13:00-13:15 Izabela Domagalska (Instytut Fizyki, PCz)
Termodynamika nieekstensywna nanogazu złożonego z M molekul wodoru

Sesja 3 chairman: prof. dr hab. inż. Zbigniew Domański

- 14:15-15:00 dr Piotr Kozłowski (Wydział Fizyki, UAM)
Struktura i własności magnetyczne wybranych politlenków wanadu o mieszanych stanach walencyjnych
- 15:00-15:15 dr hab. inż. Bartłomiej Spisak (Instytut Fizyki i Informatyki Stosowanej, AGH)
Dynamika kwantowa w przestrzeni fazowej. Ujęcie propagatorowe
- 15:15-15:30 dr inż. Maciej Wołoszyn (Instytut Fizyki i Informatyki Stosowanej, AGH)
Zastosowanie funkcji Wignera do analizy własności transportowych układów kwaziperiodycznych
- 15:30-15:45 dr Jarosław Paturej (Instytut Fizyki, US)
Cylindryczne szczotki polimerowe – element składowy nowych materiałów o niezwykłych właściwościach mechanicznych

Sesja 4 chairman: prof. dr hab. Romuald Lemański

- 16:00-16:15 dr Joanna K. Kalaga (Instytut Fizyki, UZ)
EPR-sterowalność w układzie trzech kubitów
- 16:15-16:30 mgr Dagmara Sztolberg (Instytut Fizyki, UZ)
Własności optyczne proszku LaAlO_3 domieszkowanego jonami chromu
- 16:30-16:45 mgr Zbigniew Wojtkowiak (Wydział Fizyki, UAM)
Numeryczne obliczanie ciepła przemiany na podstawie histogramu rozkładu energii w trójwymiarowym modelu Ashkina-Tellera
- 16:45-17:00 dr Michał Antkowiak (Wydział Fizyki, UAM)
Uniwersalna sekwencja stanów podstawowych i uporządkowanie poziomów energetycznych w sfrustrowanych pierścieniach antyferromagnetycznych z defektem jednego wiązania

Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe w świetle najnowszych wyników teoretycznych i doświadczalnych

Artur P. Durajski^(*)

Instytut Fizyki, Politechnika Częstochowska

W grudniu 2014 roku zaprezentowano pierwsze wyniki eksperymentalne [1], poprzedzone wynikami teoretycznymi [2], które dowodzą, że związek H_2S znajdujący się pod wysokim ciśnieniem posiada ekstremalnie wysokie wartości temperatury krytycznej. W szczególności, w zakresie ciśnień od 115 do 200 GPa, temperatura krytyczna rośnie od 31 do 150 K. Dodatkowo należy podkreślić fakt, że zaobserwowano silny efekt izotopowy, co wyraźnie sugeruje elektronowo-fononowe pochodzenie stanu nadprzewodzącego. Co ciekawe, w skutek dysocjacji wyjściowego związku, najprawdopodobniej według schematu: $3H_2S \rightarrow 2H_3S + S$, wyindukował się stan nadprzewodzący o temperaturze krytycznej wynoszącej aż 203 K ($p = 150$ GPa) [1]. Z fizycznego punktu widzenia uzyskany rezultat oznacza, że odkryto nadprzewodnik o najwyższej znanej wartości temperatury krytycznej. Dotychczasowy rekord należał do tlenowych związków miedzi, które charakteryzowały się maksymalną temperaturą krytyczną równą 164 K [3]. W przypadku miedzianów zasadniczy problem związany jest z poprawnym określeniem mechanizmu parującego odpowiedzialnego za kondensację elektronów w pary Coopera. W literaturze dominuje pogląd, iż główną rolę odgrywają silne korelacje Elektronowe modelowane w ramach teorii Hubbarda lub modelu t-J. Z drugiej strony wiele danych eksperymentalnych wskazuje również na istotne znaczenie oddziaływania elektron-fonon.

Podczas XXI Minisymposium Fizyki Statystycznej zaprezentowane zostaną wszystkie istotne parametry stanu nadprzewodzącego indukującego się w związku H_3S oraz siostrzanym układzie PH_3 . Obliczenia numeryczne przeprowadzono w ramach klasycznego oraz rozszerzonego o poprawki wierzchołkowe formalizmu Eliashberga [4-6]. Dodatkowo przedstawiony zostanie model oparty na hamiltonianie z członem oddziaływania typu elektron-fonon i elektron-elektron-fonon, który w sposób bardzo precyzyjny pozwala na opis wybranych wielkości charakteryzujących stan nadprzewodzący w nadprzewodnikach niekonwencjonalnych – miedzianach [7,8].

^(*) adurajski@wip.pcz.pl

1. A. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, et al., *Nature* **525**, 73 (2015)
2. Y. Li, J. Hao, H. Liu, Y. Li, Y. Ma, *J. Chem. Phys.* **140**, 174712 (2014)
3. L. Gao, Y. Y. Xue, F. Chen, et al., *Phys. Rev. B* **50**, 4260 (1994)
4. A.P. Durajski, R. Szczyński, L. Pietronero, *Ann. Phys.* **528**, 358 (2016)
5. A.P. Durajski, R. Szczyński, Y. Li, *Physica C* **515**, 1 (2015)
6. A.P. Durajski, *Sci. Rep.* **6**, 38750 (2016)
7. R. Szczyński, *PloSONE* **7**, e31873 (2012)
8. R. Szczyński, A.P. Durajski, *Supercond. Sci. Technol.* **27**, 125004 (2014)

Struktura i magnetyzm wybranych politlenków wanadu o mieszanych stanach walencyjnych

Piotr Kozłowski,^(*)¹ K. Yu. Monakhov,² O. Linnenberg,² J. van Leusen,² C. Besson,² T. Secker,² U. Englert,² P. Kögerler,² X. López,³ J. M. Poblet³

¹ Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

² Institut für Anorganische Chemie, RWTH Aachen University, Aachen, Germany

³ Departament de Química Física i Inorgànica, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, Spain

Politlenki wanadu zawierające jony wanadu w różnych stopniach utleniania stanowią grupę magnetyków molekularnych o ciekawych własnościach magnetycznych, ale są zwykle trudne w modelowaniu. W niniejszym wykładzie zostaną przedstawione dwa przykłady takich magnetyków: $[\text{VO}_2\text{F}_2@ \text{HV}_{22}\text{O}_{54}]^{6-}$ zawierający niezlokalizowane elektrony oraz $(\text{NEt}_4)_5[\text{V}_{16}\text{O}_{38}(\text{Br})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ o skomplikowanej strukturze krystalicznej.

$[\text{VO}_2\text{F}_2@ \text{HV}_{22}\text{O}_{54}]^{6-}$ według obliczeń chemicznych zawiera 6 magnetycznych elektronów niezlokalizowane i dwa zlokalizowane. Uproszczone modelowanie zaniebujące energią kinetyczną było w stanie wyjaśnić w sposób jakościowo poprawny magnetyzm tej molekuly [1]. Jednak dopiero zastosowanie półklasycznego modelu t-j (energia kinetyczna traktowana klasycznie) inspirowanego wynikami obliczeń DFT pozwoliło na dokładne modelowanie własności magnetycznych. Okazało się, że jest ono możliwe tylko wtedy, gdy liczba elektronów niezlokalizowanych jest nieparzysta i wynosi 5 lub 7. Ostatecznie najlepsze wyniki zostały otrzymane gdy uwzględniono mieszanekę 3 molekul o różnej protonacji: $[\text{VO}_2\text{F}_2@ \text{HV}_{22}\text{O}_{54}]^{6-}$, $[\text{VO}_2\text{F}_2@ \text{H}_2\text{V}_{22}\text{O}_{54}]^{6-}$, $[\text{VO}_2\text{F}_2@ \text{V}_{22}\text{O}_{54}]^{6-}$.

$(\text{NEt}_4)_5[\text{V}_{16}\text{O}_{38}(\text{Br})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ krystalizuje jako skomplikowany kryształ bliźniaczy, co w sposób istotny utrudnia poprawne określenie jego struktury oraz konfiguracji elektronów walencyjnych. Konfiguracja elektronów walencyjnych determinuje stosunek magnetycznych jonów wanadu V^{4+} do jonów niemagnetycznych V^{5+} , który ma istotny wpływ na magnetyzm tego związku. Dokładne symulacje własności magnetycznych w różnych scenariuszach strukturalnych pozwoliły nie tylko wyjaśnić magnetyzm tej molekuly, ale także rzucić nowe światło na jej strukturę. Wykazano, że średni stosunek magnetycznych jonów wanadu V^{4+} do jonów niemagnetycznych V^{5+} , który według obliczeń chemicznych powinien wynosić 8:8 jest w rzeczywistości wynikiem koegzystencji w jednym kryształce 4 różnych molekul o stosunku $\text{V}^{4+} : \text{V}^{5+}$ równym 8:8, 8:8, 7:9, 9:7.

(*) kozl@amu.edu.pl

1. K. Yu. Monakhov, O. Linnenberg, P. Kozłowski, J. van Leusen, C. Besson, T. Secker, A. Ellern, X. López, J. M. Poblet, P. Kögerler, Chemistry – A European Journal **21**, 2387 (2015)

Opis teoretyczny pierścieni molekularnych uwzględniający elektronowe stopnie swobody oraz fluktuacje spinowe jonów magnetycznych

Romuald Lemański,^(*) Jacek Matysiak

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, Wrocław

Zaprezentowany zostanie model, który z jednej strony odtwarza spektrum energetyczne różnych konfiguracji magnetycznych otrzymane metodą DFT i jednocześnie pozwala na uzyskanie takiej sekwencji niskoenergetycznych wzbudzeń, która jest zbliżona do otrzymanej na podstawie danych eksperymentalnych. Model ten jest uogólnieniem spinowej wersji modelu Falicova-Kimballa, w którym dołączono wyrazy odpowiadające kwantowym fluktuacjom pomiędzy różnymi konfiguracjami magnetycznymi jonów.

W referacie zostaną przedstawione przesłanki prowadzące do wyboru takiego modelu, jego związki z modelem Heisnberga, potencjalne możliwości zastosowania i rozszerzenia, jak również jego ograniczenia.

^(*) R.Lemanski@int.pan.wroc.pl

Uniwersalna sekwencja stanów podstawowych i uporządkowanie poziomów energetycznych w sfrustrowanych pierścieniach antyferromagnetycznych z defektem jednego wiązania

Michał Antkowiak,^(*) Grzegorz Kamieniarz, Wojciech Florek

Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Ustaliliśmy uniwersalną sekwencję stanów podstawowych sfrustrowanych pierścieni antyferromagnetycznych z nieparzystą liczbą spinów s i defektem α jednego wiązania, modelowanych izotropowym hamiltonianem Heisenberga [1]. Sekwencja cechuje się całkowitym spinem $S \leq s$ i zawiera wszystkie spiny należące do dozwolonego przedziału. Potwierdza to klasyfikację frustracji w nanomagnetykach tego typu.

Dla $S' \geq S$ występuje uporządkowanie poziomów Lieba-Mattisa [1] $E(S' + 1) > E(S')$, gdzie $E(S')$ to najniższa energia stanów opisanych przez liczbę kwantową S' . Nasze obliczenia, wskazujące na rolę dwudzielności [1], wykazały nieoczekiwane cechy badanego modelu: większe pierścienie o niedwudzielnej strukturze oddziaływań dziedziczą konsekwencje twierdzenia Lieba-Mattisa swoich dwudzielnych archetypów.

^(*) antekm@amu.edu.pl

1. G. Kamieniarz, W. Florek, M. Antkowiak, Phys. Rev. B. **92**, 140411(R) (2015)

Termodynamika nieekstensywna nanogazu złożonego z M molekuł wodoru

Izabela Domagalska,^(*) Radosław Szczęśniak, Ewa Drzazga, Artur P. Durajski, Małgorzata Kostrzewa

Instytut Fizyki, Politechnika Częstochowska

Nieekstensywną fizykę statystyczną zapostulował w 1988 roku Constantino Tsallis [1], proponując nieaddytywną entropię. Entropia Tsallisa jest uznawana jako uogólnienie teorii Boltzamna-Gibbsa. W badaniach wzięliśmy pod uwagę rozrzedzone nanogazy zawierające $M \geq 3$ molekuły. W ramach nieekstensywnej fizyki statystycznej wyznaczyliśmy ich entropię, energię wewnętrzną oraz ciepło właściwe.

^(*) iza.domagalska@wp.pl

1. C. Tsallis, J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988)

Zastosowanie metody Monte Carlo Wanga–Landaua do modelowania własności termicznych i mechanicznych pojedynczych pierścieni polimerowych w roztworze

Franco Ferrari^(*)

Instytut Fizyki, Uniwersytet Szczeciński

Tematem niniejszego referatu są właściwości i sposób zachowania się w roztworach pojedynczych łańcuchów polimerowych w postaci węzłów. Polimery są modelowane na prostej sieci sześcienniej. Ich własności statystyczne są badane w oparciu o wykresy średnich wartości oczekiwanych kilku obserwabli, takich jak energia właściwa, właściwa pojemność cieplna oraz tzw. promień bezwładności. W przypadku gdy łańcuch jest rozciągnięty przy użyciu zewnętrznej siły skierowanej wzdłuż osi z, mierzona jest również wysokość punktu zaczepienia siły. Średnie są obliczone za pomocą metody Monte Carlo w wariacie algorytmu Wanga-Landaua. Algorytm został odpowiednio przyśpieszony oraz zrównoleglony tak, aby umożliwić próbkowanie wielkich liczb (rzędu kilkudziesięciu do kilkunastu miliardów) konformacji węzłów. Przedstawione wyniki dotyczą węzłów różnego typu, na przykład tzw. koniczyny (*trefoil knot*), ósemki (*figure-eight knot*) i wielu innych. Z wykonanej analizy wynika, iż łańcuchy polimerowe w postaci węzłów mają bogatą różnorodność zachowań, które mogą być wykorzystane do dostrojenia właściwości materiałów polimerowych. Na przykład, polimery takie puchną szybciej albo wolniej pod wpływem wzrastającej temperatury w zależności od rodzaju węzła oraz oddziaływań pomiędzy monomerami. W trakcie referatu pokazane będą również interesujące cechy rozciągniętych węzłów, które w niskich temperaturach relaksują się skokowo.

^(*) franco@feynman.fiz.univ.szczecin.pl

Dynamika molekuly wodoru z zewnętrznym wymuszeniem

Marcin Jarosik^(*)

Instytut Fizyki, Politechnika Częstochowska

W trakcie prezentacji zostaną przedstawione wyniki badań, w ramach których analizowano dynamikę molekuly wodoru poddanej działaniu zewnętrznego wymuszenia. Strukturę energetyczną molekuly wodoru w zależności od ciśnienia wyznaczono z pierwszych zasad. Następnie przeanalizowano drgania molekuly w obecności zewnętrznej, periodycznej siły rozciągającej w zależności od jej amplitudy i częstości. Pozwoliło to na wyznaczenie obszarów stabilności i niestabilności rozpatrywanej molekuly. Ponadto stwierdzono też możliwość występowania drgań chaotycznych, pojawiających się w obszarze niestabilności molekuly.

^(*) jarosikmw@wip.pcz.com

EPR-sterowalność w układzie trzech kubitów

Joanna K. Kalaga,^(*) Wiesław Leoński

Instytut Fizyki, Uniwersytet Zielonogórski

EPR-sterowalność obok splątania jest takim rodzajem korelacji, które nie występują w układach klasycznych. W naszych badaniach rozważamy kwantowe korelacje w układach trójkubitowych, a przede wszystkim koncentrujemy się na możliwości uzyskania stanów sterowalnych. W tym celu analizujemy parametr sterowalności bazujący na nierówności Cavalcantiego [1–3] i pokazujemy, że w układzie trzech kubitów możemy obserwować jedynie sterowalność asymetryczną. Następnie obliczamy parametry splątania, takie jak ujemność (*negativity*) oraz zbieżność (*concurrence*), pokazując, że w przypadku stanów dwukubitowych sterowalność pojawia się tylko wtedy gdy ujemność jest ograniczona do pewnego zakresu wartości.

^(*) J.Kalaga@if.uz.zgora.pl

1. E. G. Cavalcanti, M. D. Reid, J. Mod. Opt. **54**, 2373 (2007)

2. E. G. Cavalcanti, P. D. Drummond, H. A. Bachor, M. D. Reid, Opt. Express **17**, 18693 (2009)

3 E. G. Cavalcanti, Q. Y. He, M. D. Reid, H. M. Wiseman, Phys. Rev. A **84**, 032115 (2011)

Anomalne własności termodynamiczne modelu Falicova-Kimballa przy małych wartościach parametru oddziaływania

Jakub Krawczyk,^(*) Romuald Lemański

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, Wrocław

W przypadku dużych wartości parametru oddziaływania U , parametr porządku w modelu Falicova-Kimballa przyjmuje postać Curie-Weissa. Natomiast w granicy małych U , van Dongen [1] wykazał gwałtowny spadek parametru porządku w pobliżu $T \approx T_C/2$. W referacie zostaną przedstawione wyniki obliczeń parametru porządku oraz ciepła właściwego w funkcji temperatury dla różnych wartości parametru U . Okazuje się, że dla małych U obie te wielkości zachowują się w sposób nietypowy, znacznie odbiegający od tego jaki jest w przypadku dużych U . Obliczenia zostały wykonane metodą dynamicznego pola średniego (DMFT).

^(*) j.krawczyk@int.pan.wroc.pl

1. P.G.J. van Dongen, Phys. Rev. B **45**, 2267 (1992)

Własności pierścienia molekularnego Cr₈ otrzymane w oparciu o model uwzględniający elektronowe stopnie swobody i fluktuacje spinowe jonów magnetycznych

Jacek Matysiak,^(*) Romuald Lemański

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, Wrocław

Molekuła Cr₈F₈(O₂CH)₁₆ (w skrócie Cr₈) jest najbardziej znanym przedstawicielem szerszej rodziny pierścieni antyferromagnetycznych zbudowanych na bazie jonów chromu. Jak potwierdzają dane eksperymentalne, własności magnetyczne tej molekuly dobrze opisane są fenomenologicznym modelem uwzględniającym oddziaływania wymienne oraz wpływ pola krystalicznego [1,2]. Dotychczas, do opisu teoretycznego molekuly Cr₈ wykorzystano również obliczenia *ab initio* typu DFT, jednak wyznaczona na ich podstawie wartość sprzężenia magnetycznego dość znacznie odbiegała od tej, która została przyjęta w podejściu fenomenologicznym [3,4].

Podczas XXI Minisymposiumu Fizyki Statystycznej zaprezentowana zostanie próba odtworzenia własności magnetycznych molekuly Cr₈ za pomocą modelu uwzględniającego elektronowe stopnie swobody oraz fluktuacje spinowe jonów magnetycznych. Przeanalizowane będą różne warianty fluktuacji magnetycznych oraz ich wpływ na właściwości stanu podstawowego. Otrzymane wyniki zostaną porównane z danymi eksperymentalnymi oraz wynikami obliczeń opartymi na innych modelach teoretycznych.

^(*) j.matysiak@int.pan.wroc.pl

1. S. Carretta *et al.*, Phys. Rev. B **67**, 094405 (2003)
2. M. Affronte *et al.*, Phys. Rev. B **68**, 104403 (2003)
3. V. Bellini, A. Olivieri, F. Manghi, Phys. Rev. B **73**, 184431 (2006)
4. T. Ślusarski, B. Brzostowski, D. Tomecka, G. Kamieniarz, J. Nanosci. Nanotechnol. **11**, 9080 (2011)

Cylindryczne szczotki polimerowe - element składowy nowych materiałów o niezwykłych właściwościach mechanicznych

Jarosław Paturej,^(*)¹ Sergei S. Sheiko,² Sergey Panyukov,³ Michael Rubinstein²

¹ Instytut Fizyki, Uniwersytet Szczeciński

² University of North Carolina, Chapel Hill, USA

³ P.N. Lebedev Physics Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Istnieje fundamentalna granica uniemożliwiająca obniżenie modułu sprężystości tradycyjnych materiałów polimerowych poniżej wartości 100 kPa. Ograniczenie to jest powodowane obecnością splątń (więzów topologicznych) między łańcuchami polimerowymi. W wielu zastosowaniach niezwykle pożądaną są jednak stabilne i jednocześnie bardzo miękkie materiały polimerowe (o module sprężystości G w zakresie 0.1–1.0 kPa). W referacie przedstawione zostaną podstawowe własności strukturalne i dynamiczne nowego typu „supermiękkiego” materiału polimerowego ($G \sim 0.1$ kPa) opartego na tzw. cylindrycznych szczotkach polimerowych.

^(*) jaturej@univ.szczecin.pl

Dynamika kwantowa w przestrzeni fazowej. Ujęcie propagatorowe

Bartłomiej Spisak^(*)

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Akademia Górniczo-Hutnicza, Kraków

Jedną z możliwych realizacji teorii kwantów jest sformułowanie mechaniki kwantowej w przestrzeni fazowej za pomocą funkcji Wignera. W ramach tego sformułowania zostanie zaprezentowana metoda propagatorowa oraz jej związek z równaniem Liouville'a. Omówione zostaną także najważniejsze konsekwencje wynikające z rozważanego podejścia, a całość będzie zilustrowana prostym przykładem.

^(*) bjs@agh.edu.pl

Własności optyczne proszku LaAlO_3 domieszkowanego jonami chromu

Dagmara Sztolberg^(*)

Instytut Fizyki, Uniwersytet Zielonogórski

Perowskit LaAlO_3 w postaci proszku domieszkowanego jonami Cr^{3+} w ilości domieszki 1 wt% został przygotowany metodą Pechiniego oraz badany metodami spektroskopowymi w temperaturze 300 K oraz 77 K. Poziomy energetyczne typowe dla jonów chromu zostały zaobserwowane i zidentyfikowane na podstawie widm absorpcji. Zmierzone zostały również widma emisji. Na podstawie danych z widma absorpcji zostały obliczone parametry pola krystalicznego.

^(*) dagmara_sztolberg@wp.pl

Numeryczne obliczanie ciepła przemiany na podstawie histogramu rozkładu energii w trójwymiarowym modelu Ashkina-Tellera

Zbigniew Wojtkowiak,^(*) Dorota Jeziorek-Knioła, Grzegorz Musiał

Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Niniejsza praca prezentuje sposób wyznaczania ciepła przemiany na podstawie histogramu rozkładu energii ($P_L(E, \beta)$) w trójwymiarowym, standardowym modelu Ashkina-Tellera (AT) w eksperymencie komputerowym, jakim są nasze symulacje Monte Carlo z obliczaniem niepewności wyznaczanych wielkości termodynamicznych. Podobnie jak w oryginalnej metodzie dla q -stanowego modelu Potts'a z q równoważnymi uporządkowanymi stanami i jednym nieuporządkowanym [1], również w trójwymiarowym modelu AT występuje charakterystyczny histogram o dwóch pikach w obszarze krytycznym.

Do pomiarów ciepła przemiany wykorzystaliśmy również kumulantę Challi V_L [2] oraz kumulantę U_L zaproponowaną przez Lee i Kosterlitz'a [1], zmodyfikowane przez Musiał'a [3] i zastosowane do modelu AT, dla energii całego układu oraz dla energii związanej z każdą składową parametru porządku oddzielnie.

Położenia $E_i(L)$ obydwu minimów zależności $-\ln P_L(E, \beta)$ dla próbek o skończonych rozmiarach $L \times L \times L$ wykazują dobrą liniową skalowalność do granicy termodynamicznej do wartości energii wewnętrznej w punkcie krytycznym po stronie uporządkowanej E_+ i po stronie nieuporządkowanej E_- i są zgodne z wartościami otrzymanymi przez nas na podstawie analiz zachowania się zmodyfikowanych kumulant V_L i U_L [3,4].

^(*) zbigniew.wojtkowiak@gmail.com

1. J. Lee, J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. **43**, 3265 (1991)
2. M. S. S. Challa, D. P. Landau, K. Binder, Phys. Rev. B **34**, 1841 (1986)
3. G. Musiał, Phys. Rev. B **69**, 024407 (2004)
4. D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, Z. Wojtkowiak, Acta Phys. Polon. A **127**, 327 (2015)

Zastosowanie funkcji Wignera do analizy własności transportowych układów kwaziperiodycznych

Maciej Wołoszyn^(*)

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Akademia Górniczo-Hutnicza, Kraków

Przedstawione zostaną wyniki obliczeń wykorzystujących równanie Wignera w zastosowaniu do układów nie posiadających symetrii translacyjnej, ale wykazujących własności kwaziperiodyczne, np. opartych na ciągu Fibonacciego. Dotyczyć będą one transportu elektronów w tego typu strukturach, w porównaniu do własności typowych układów periodycznych oraz układów nieuporządkowanych, opartych na tego samego typu modelach.

^(*) woloszyn@agh.edu.pl