

Silně korelované elektronové systémy

(obrázkový úvod do fyziky oxidů přechodových kovů)

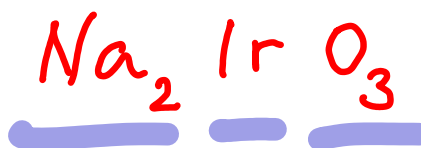
1) Co to je?

2) Od materiálu k efektivnímu modelu

3) Spinové systémy

4) Kupratové supravodiče (k čemu to je?)

Stavební kameny - chemické prvky



Lepidlo a nábojový balost

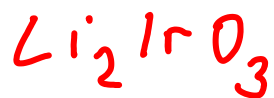
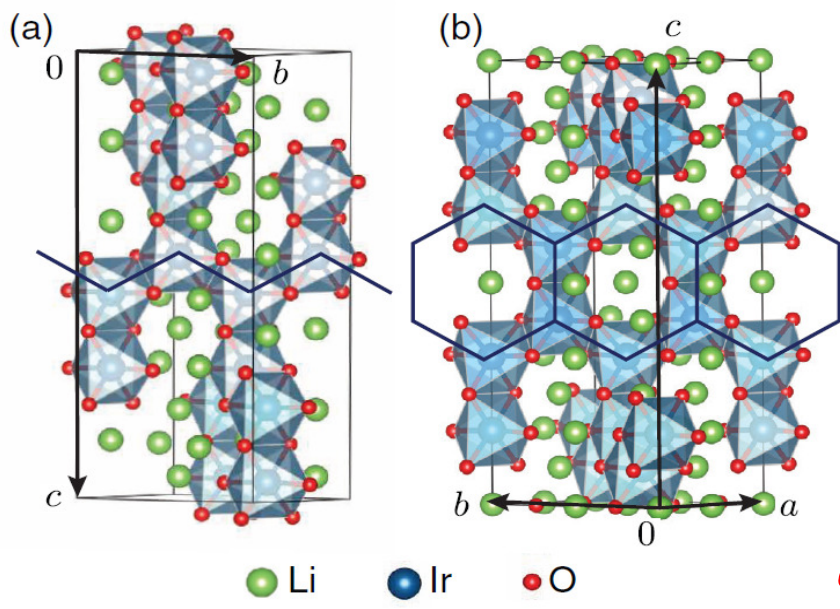
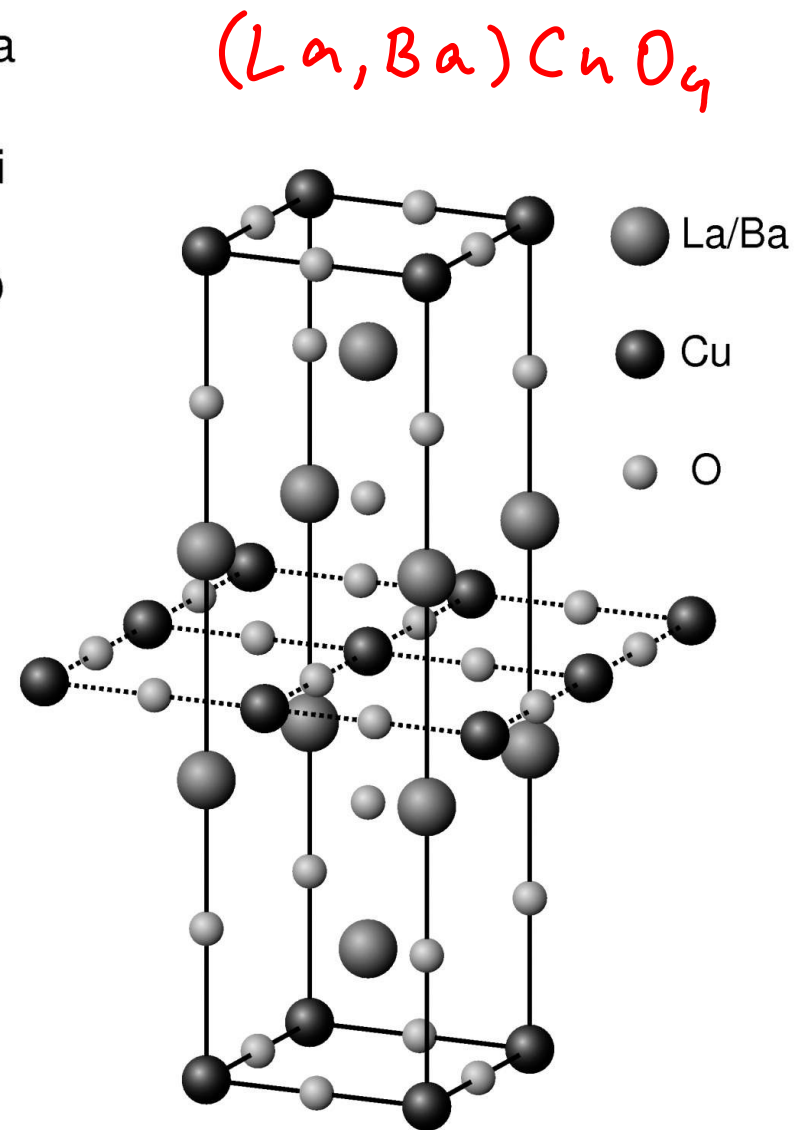
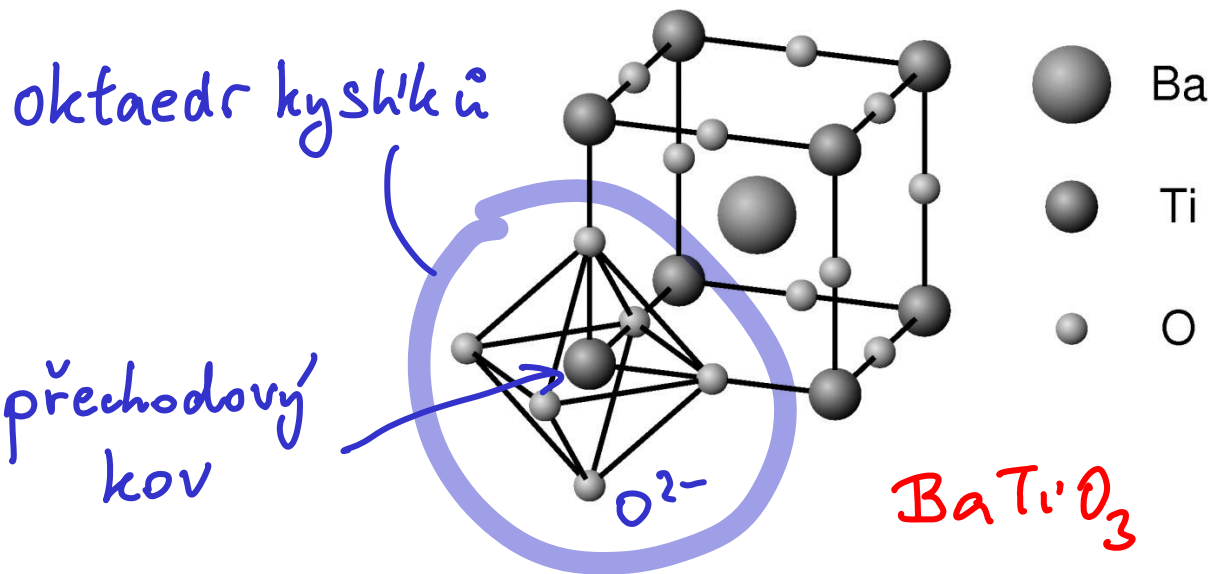
kyšička

Periodic table of the elements

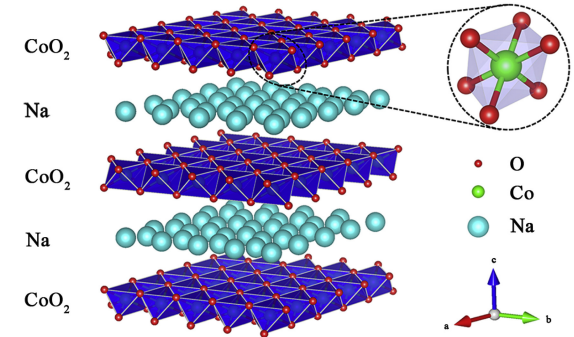
period	group 1* Ia**	2 IIa											13 IIIa	14 IVa	15 Va	16 VIa	17 VIIa	18 0
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	3 IIIb	4 IVb	5 Vb	6 VIb	7 VIIb	8 VIIIb	9	10	11 Ib	12 IIb	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	K	Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	Rb	Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	Cs	Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	Fr	Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 *** (Uub)	113 *** (Uut)	114 *** (Uuq)	115 *** (Uup)	116 *** (Uuh)		
lanthanide series 6			58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
actinide series 7			90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		

* Numbering system adopted by the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC).
 ** Numbering system widely used, especially in the U.S., from the mid-20th century.
 *** Discoveries of elements 112–116 are claimed but not confirmed. Element names and symbols in parentheses are temporarily assigned by IUPAC.

Struktura staveb - krystalové mřížky

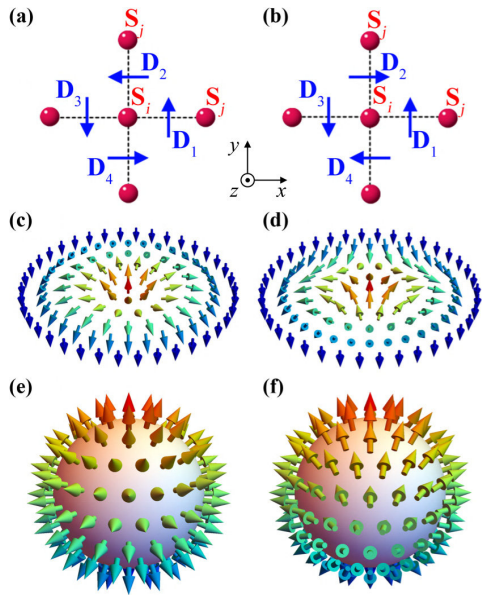


Fenomény a aplikace



vysokoteplotní' supravodivost

termoelektrina

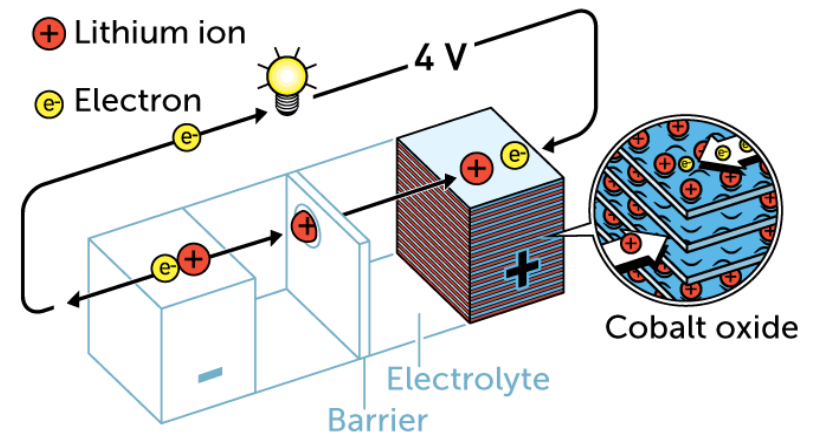


skyrmiony
(pro spintroniku)

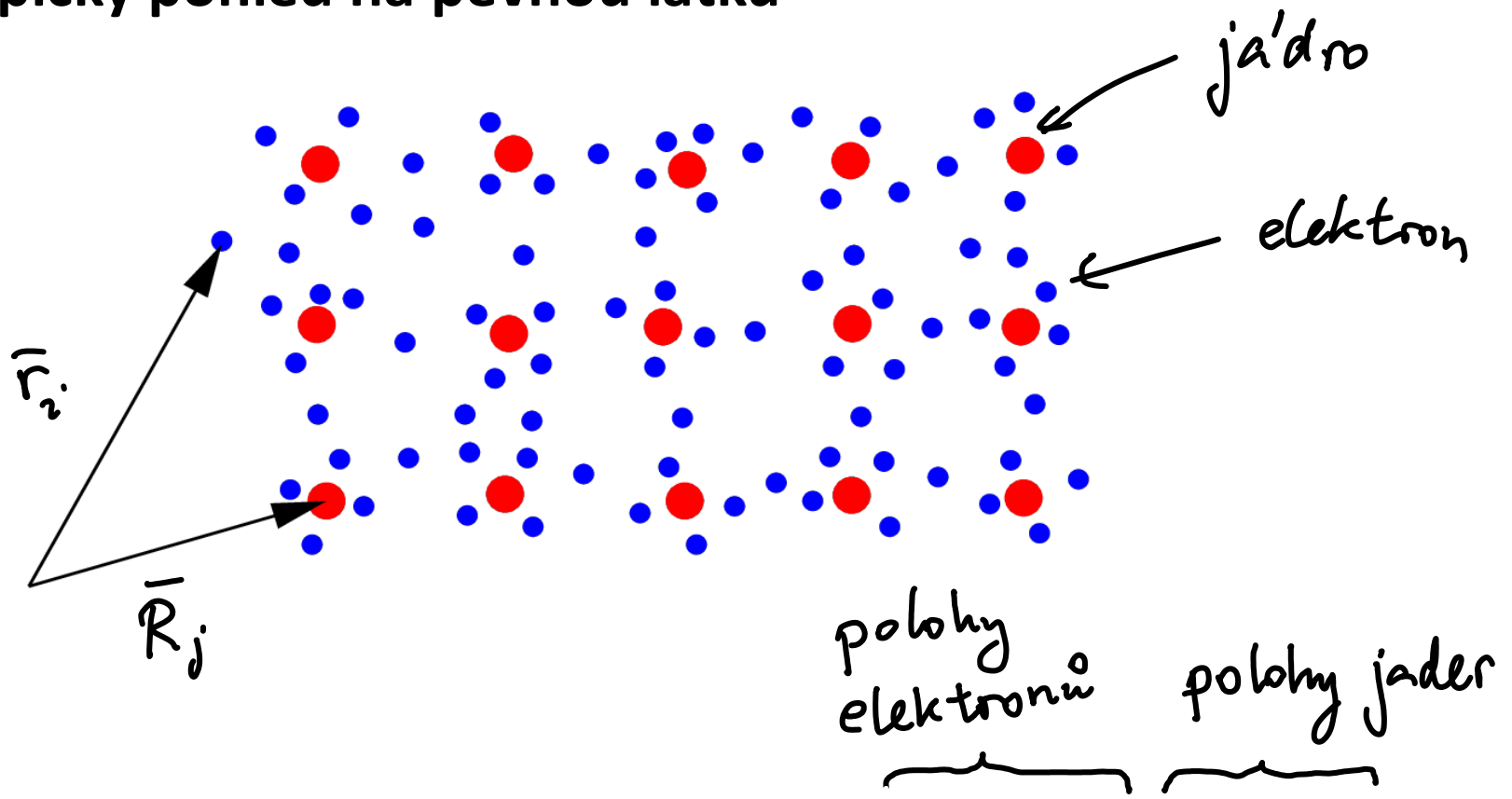


kolosální' magnetorezistence

Li-ion akumulátory



Mikroskopický pohled na pevnou látku



Stav systému dáh vlnovou funkcí

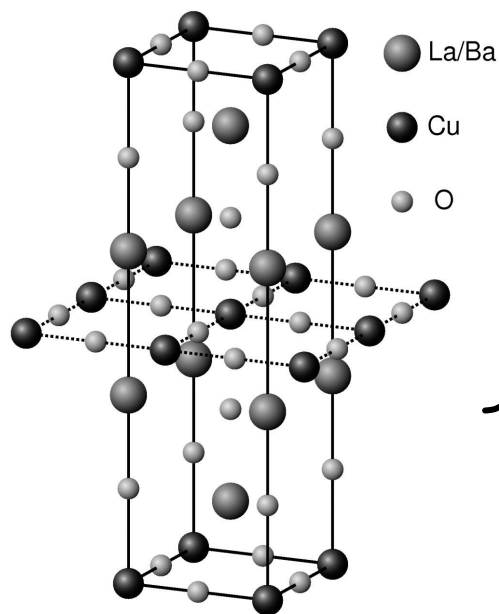
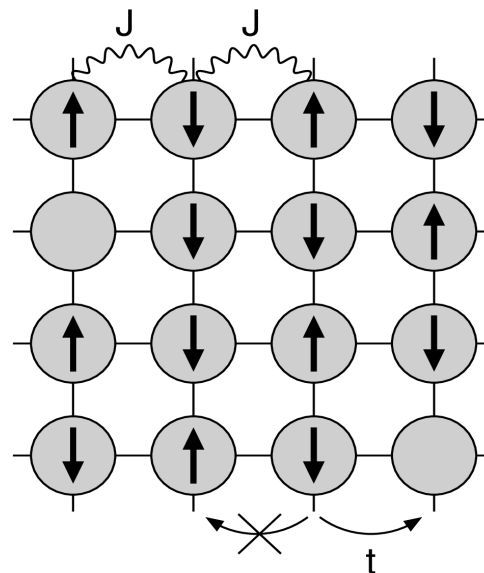
$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N, R_1, R_2, \dots)$$

kteřá je řešením parc. dif. rovnice $\hat{H}\Psi = E\Psi$ ($\sim 10^{23}$ proměnných)

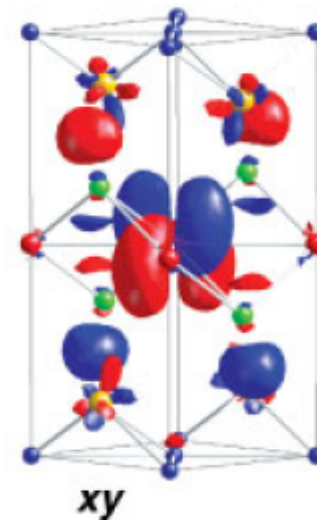
$$\hat{H} = \underbrace{\sum_i \frac{-\nabla_{r_i}^2}{2m}}_{\hat{T}_e} + \underbrace{\sum_{i < i'} \frac{e^2}{|\hat{r}_i - \hat{r}_{i'}|}}_{\hat{V}_{e-e}} + \underbrace{\sum_j \frac{-\nabla_{R_j}^2}{2M_j}}_{\hat{T}_j} + \underbrace{\sum_{j < j'} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{|\hat{R}_j - \hat{R}_{j'}|}}_{\hat{V}_{j-j}} + \underbrace{\sum_{ij} \frac{Z_j e^2}{|\hat{r}_i - \hat{R}_j|}}_{\hat{V}_{e-j}}$$

Efektivní model

zjednodušený model zachycující
klíčové fyzikální projevy



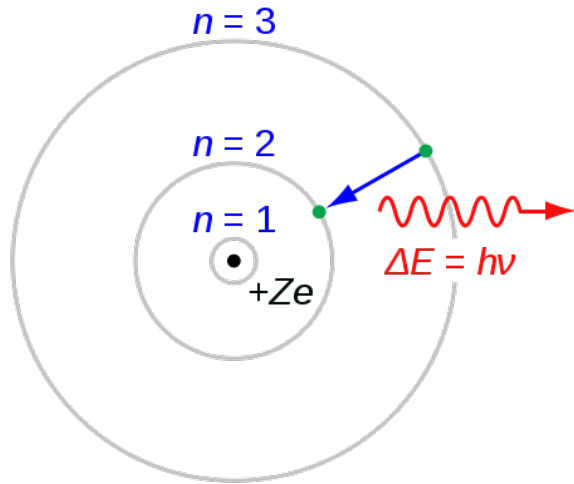
fyzikální
vhled



skutečný materiál
a experimenty na něm

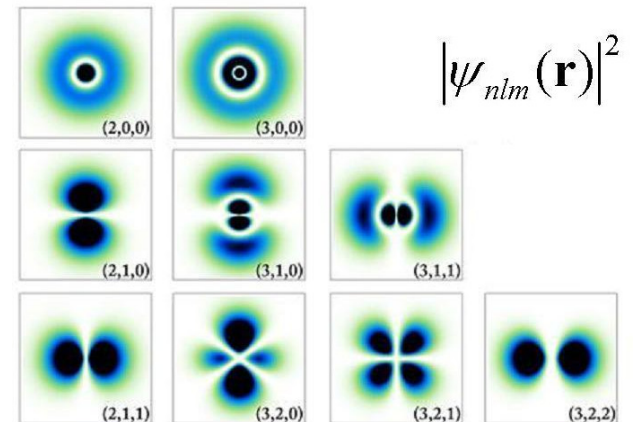
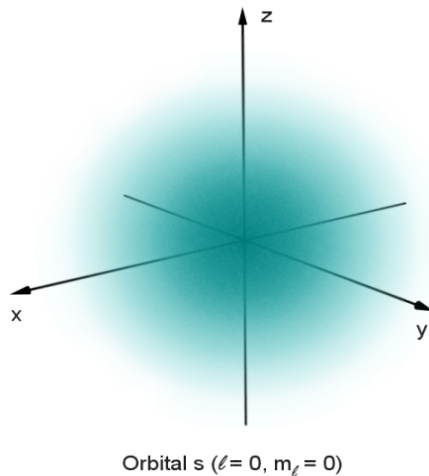
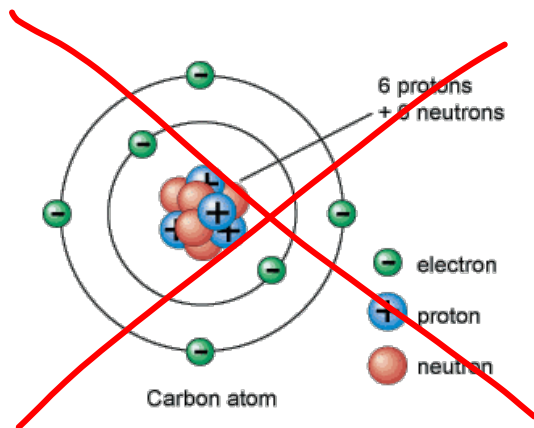
výpočty „z prvních principů“

Cesta k efektivnímu modelu 1 : základní objekty



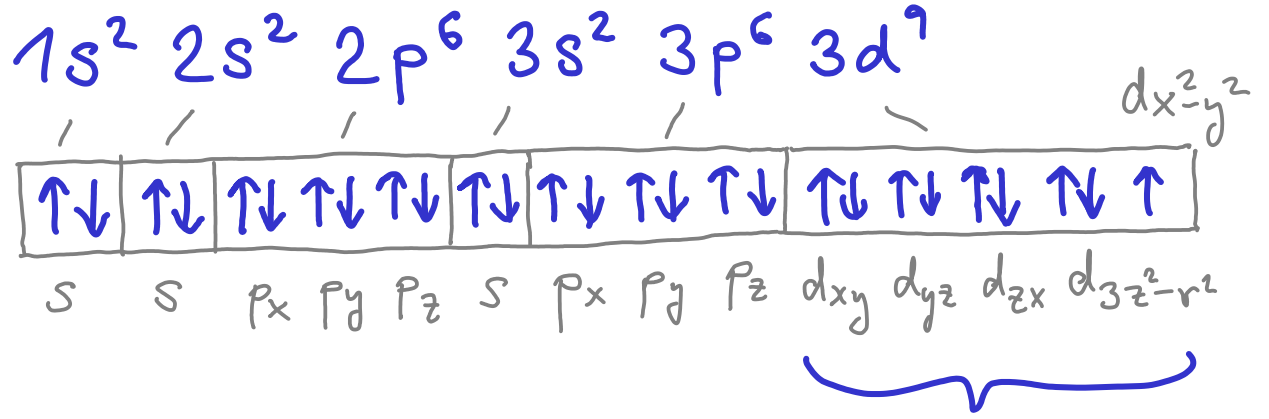
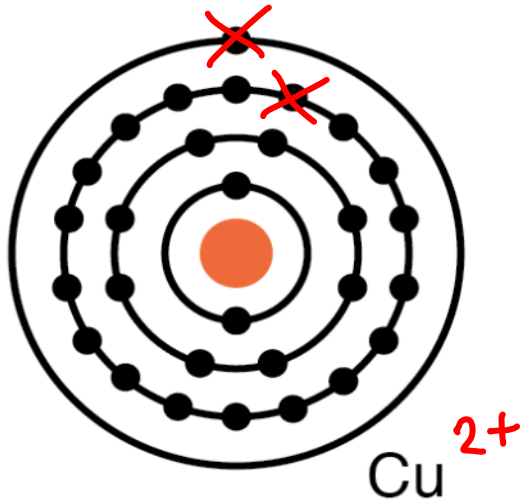
atom = kladně nabitě jádro
+ záporný elektronový obal
(soudržnost díky Coulombově interakci)

kvantově mechanický popis založen na orbitalech



oblaky elektronové hustoty

• obsazení orbitál (Aufbauprinzip)

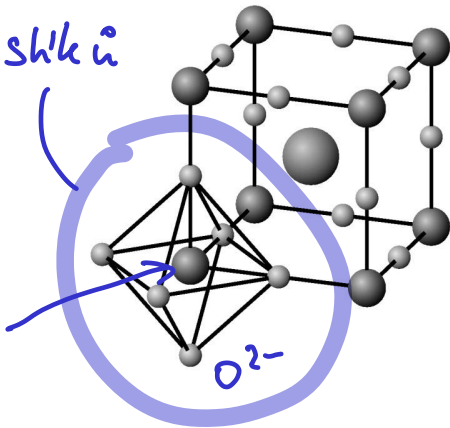


elektrony z valenční slupky mají sklony k cestám krystalem

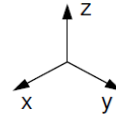
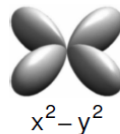
• štěpení atomových hladin v krystalovém poli

oktaedr kyslíků

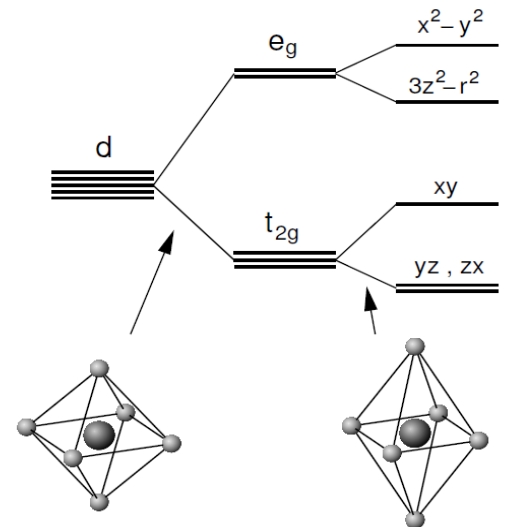
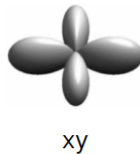
přechodový kov



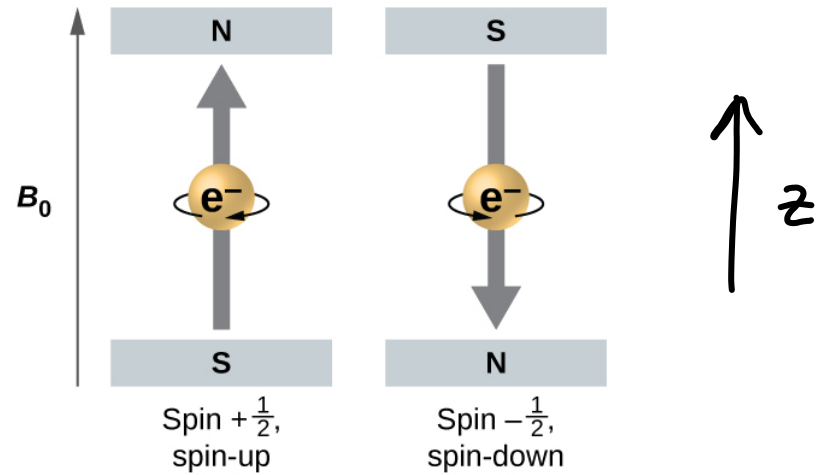
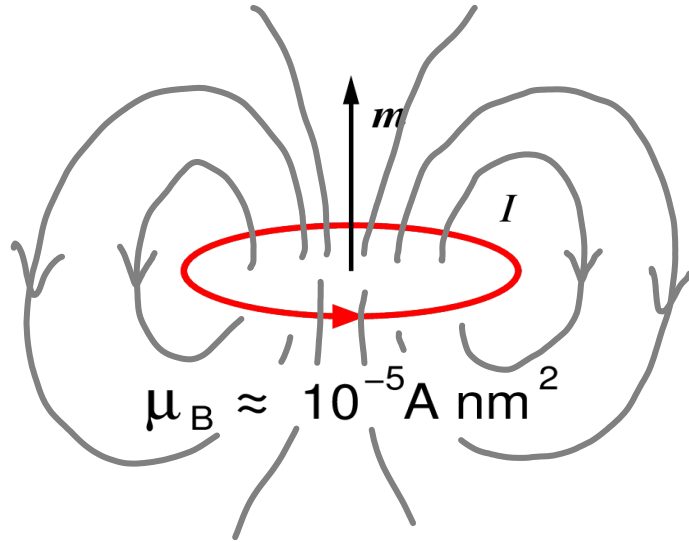
e_g orbitals



t_{2g} orbitals



- „víření“ elektronů v orbitalech přináší magnetický moment
mag. dipólový moment smyčky s proudem = proud x plocha



kromě toho „víří“ elektron interně – spin elektronu

- v kvantové mechanice je stav obecně superpozicí, pro spin $\frac{1}{2}$:

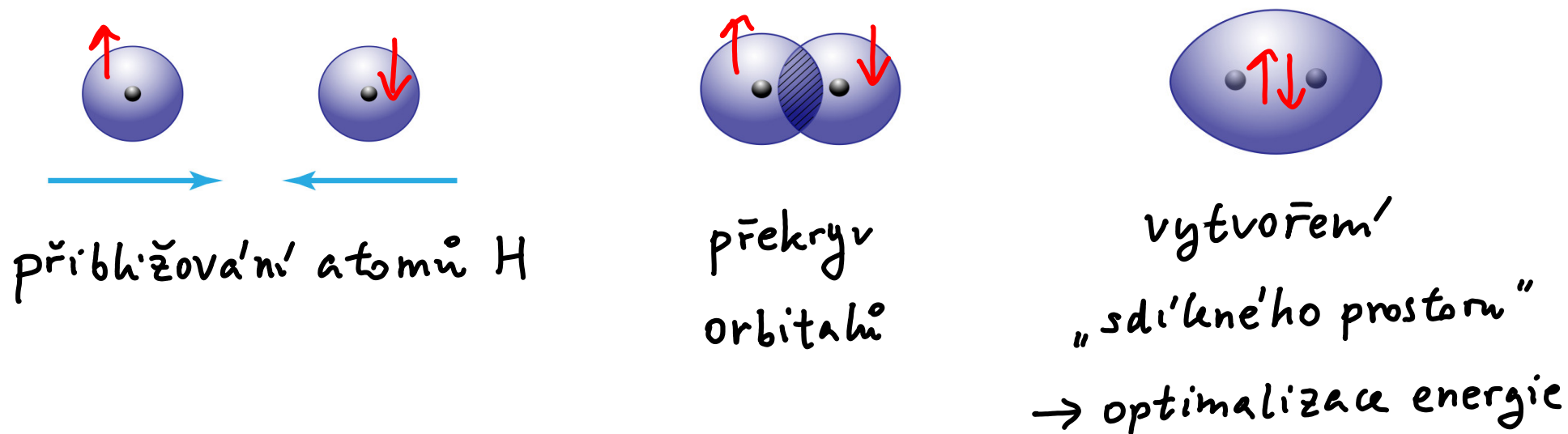
$$\text{stav} = \alpha \left| \begin{array}{c} \uparrow \\ \bullet \end{array} \right\rangle + \beta \left| \begin{array}{c} \bullet \\ \downarrow \end{array} \right\rangle$$

$$\text{stav} = \alpha \left| \begin{array}{c} \text{cat} \end{array} \right\rangle + \beta \left| \begin{array}{c} \text{bat} \end{array} \right\rangle$$

šipka ve směru osy x

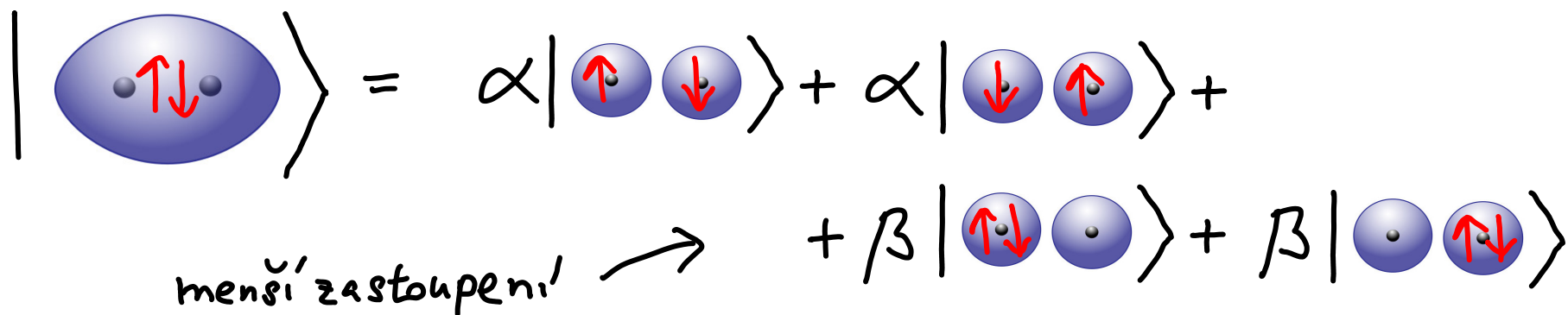
$$|\rightarrow_x\rangle = \frac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

Cesta k efektivnímu modelu 2 : chemická vazba



Pauliho princip to dovolí jen pro $\uparrow\downarrow$, ne pro konfiguraci $\uparrow\uparrow$

Na molekulu H_2 se lze dívat jako na superpozici



Cesta k efektivnímu modelu 3 : Mottův izolant

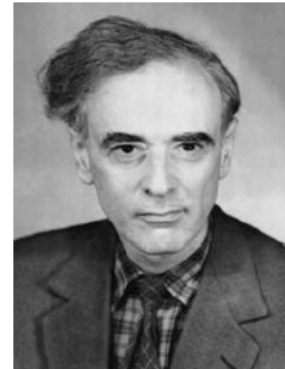
Soupeření lačnosti po pohybu W a coulombovského odpuzování $U \rightarrow$ kov \times izolant



$W \gg U$, delocalized electrons



$W \ll U$, localized electrons



Lev D. Landau

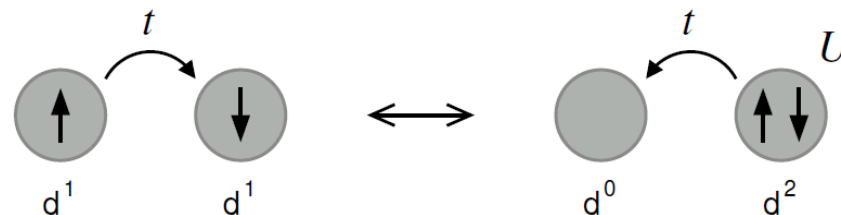


Nevill F. Mott

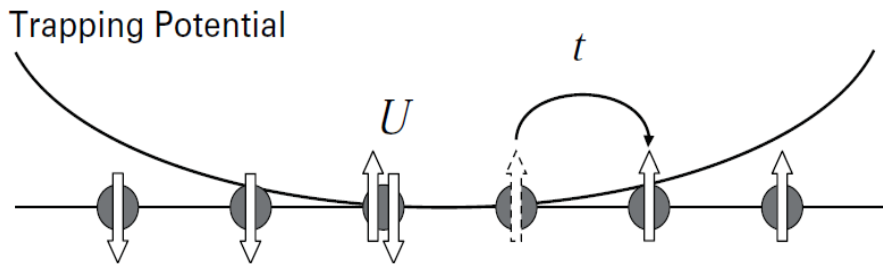
velké U - pohyb elektronů je silně korelovan

lačnost po pohybu částečně uspokojena návštěvami sousedů

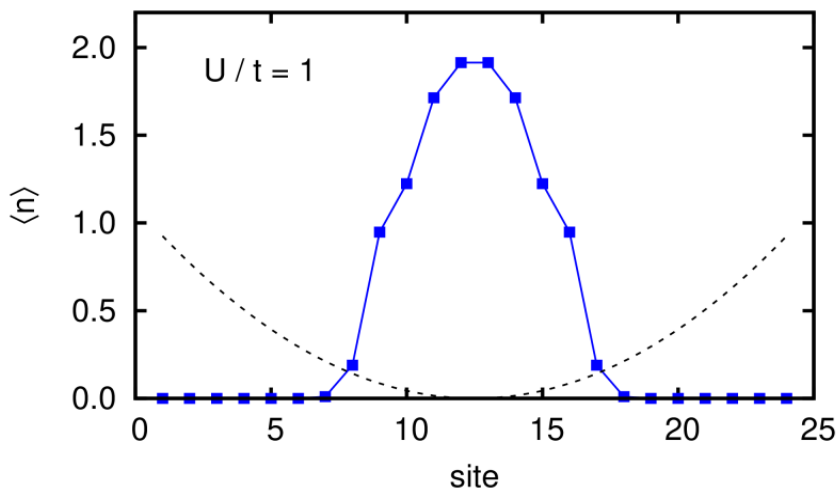
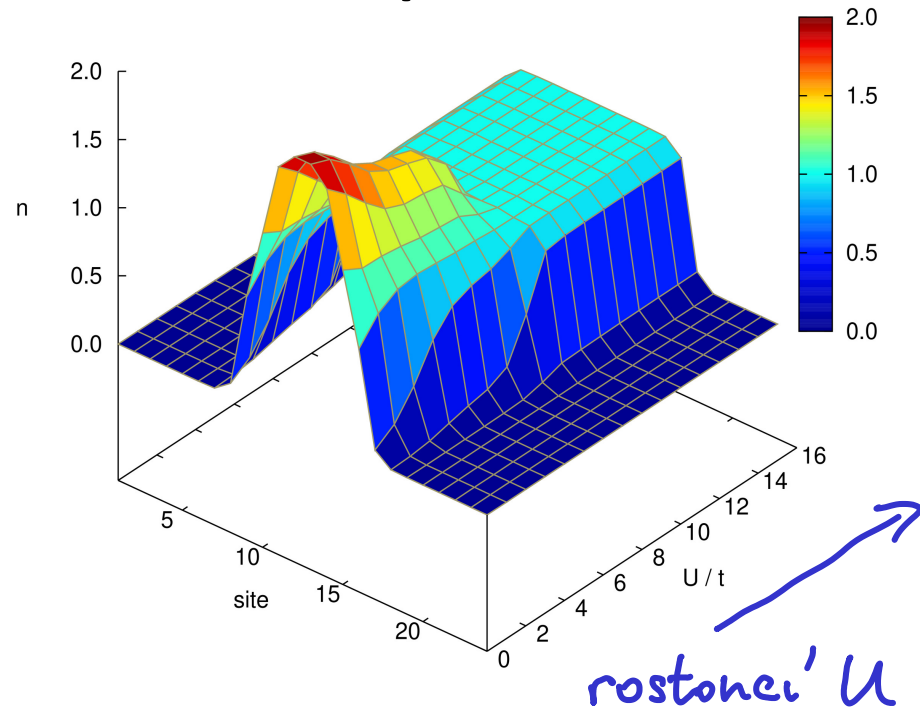
\rightarrow interakce mezi spiny



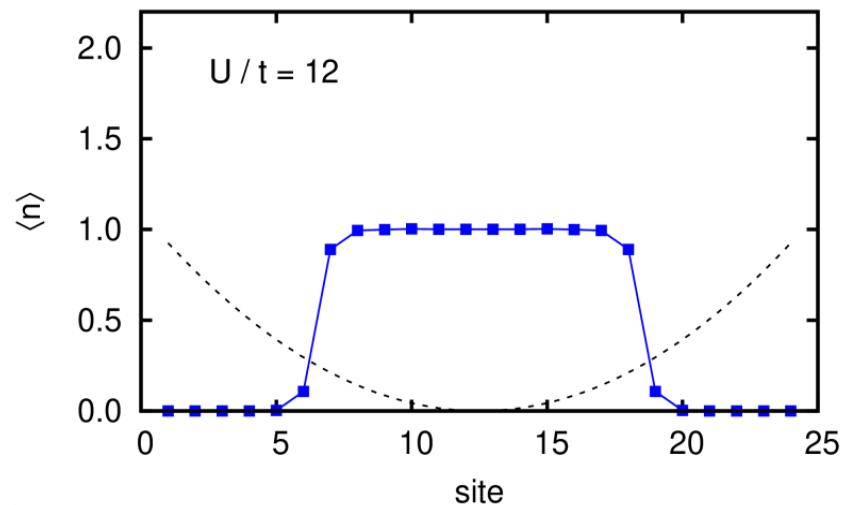
Ukázka Mottova přechodu - Hubbardův model v pasti



snaha potulovat se po dně pasti:
 X coulombovské odpuzování U



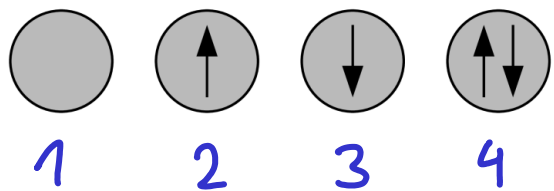
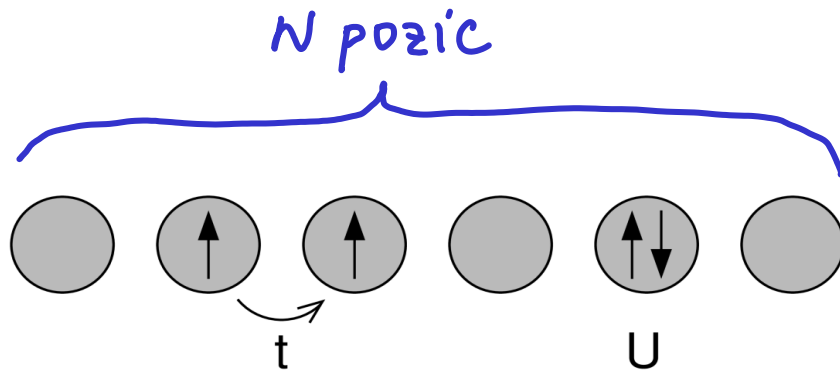
malé U - oblak bez silných korelaci'



velké U - Mottův izolant

Exponenciální škálování náročnosti

Hubbardův model na 1D řetězku



čtyři bázové stavy \rightarrow 4^N možnosti

exponenciální
růst s N

zachování částic
a jejich spinu

$$4^N \rightarrow \binom{N}{n_\uparrow} \binom{N}{n_\downarrow}$$

$$\begin{aligned} \text{stav} = & c_1 \text{ (empty sites) } + \\ & c_2 \text{ (up-down alternating) } + \\ & c_3 \text{ (up-down alternating, different phase) } \end{aligned}$$

+ 18 116 083 213 dalších

Potřebné vybavení

Dell R720x na ÚFKL



$$N=24 \quad n_{\uparrow}=n_{\downarrow}=6$$

$$\binom{24}{6}\binom{24}{6} = 18\,116\,083\,216$$

400GB

→ paměti

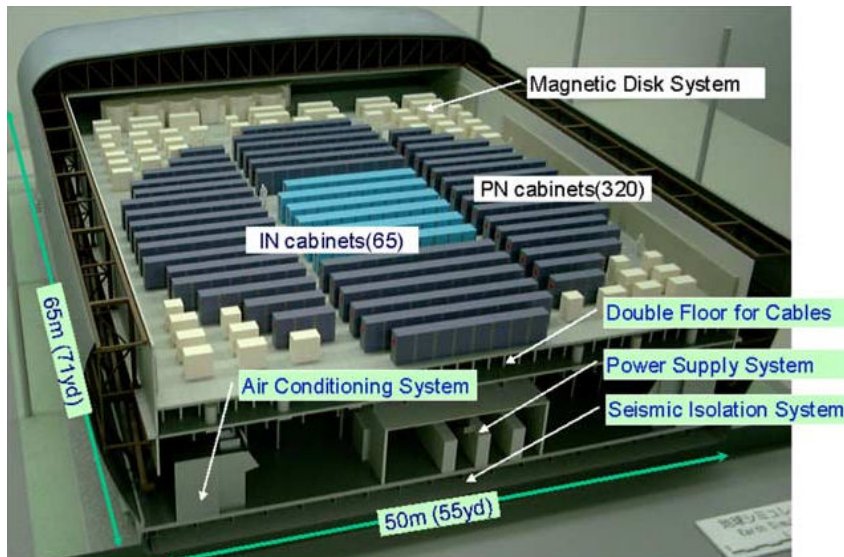
RAM

Earth Simulator - v letech 2002-2004 nejmocnější superpočítač na světě

$$N=22 \quad n_{\uparrow}=9 \quad n_{\downarrow}=8$$

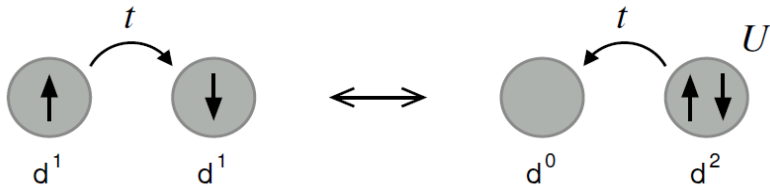
$$\binom{22}{9}\binom{22}{8} = 159\,059\,993\,400$$

→ 512/640 uzlů
7.1 TB paměti



Spinové systémy

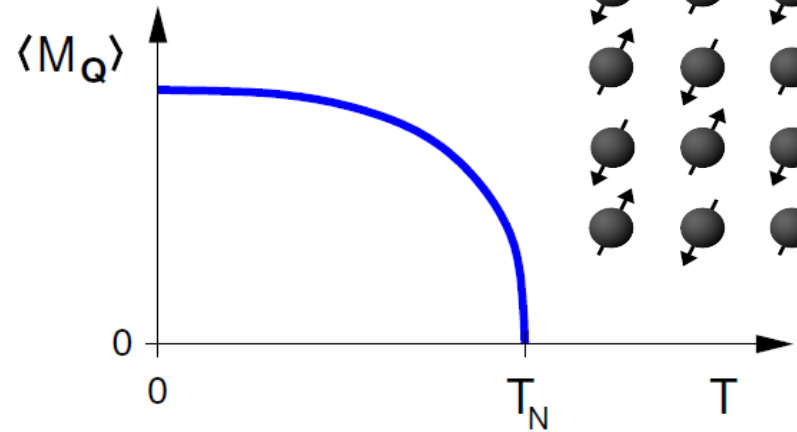
• spinové interakce



přeskoky & Pauliho princip

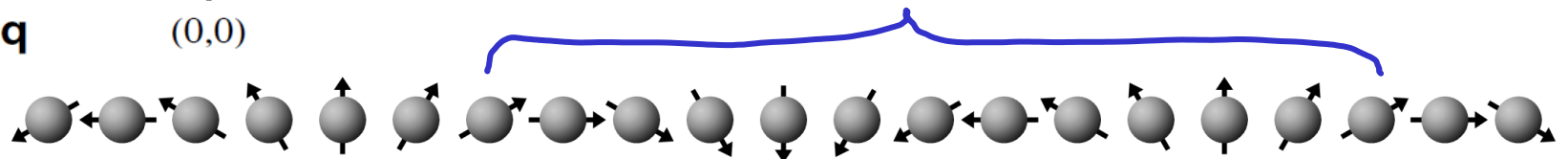
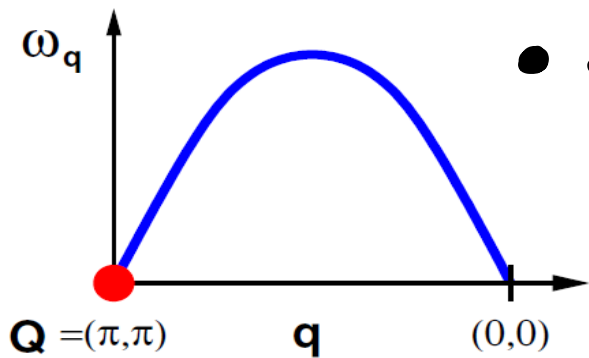
→ antiparalelní orientace spinů

• spinové uspořádkování

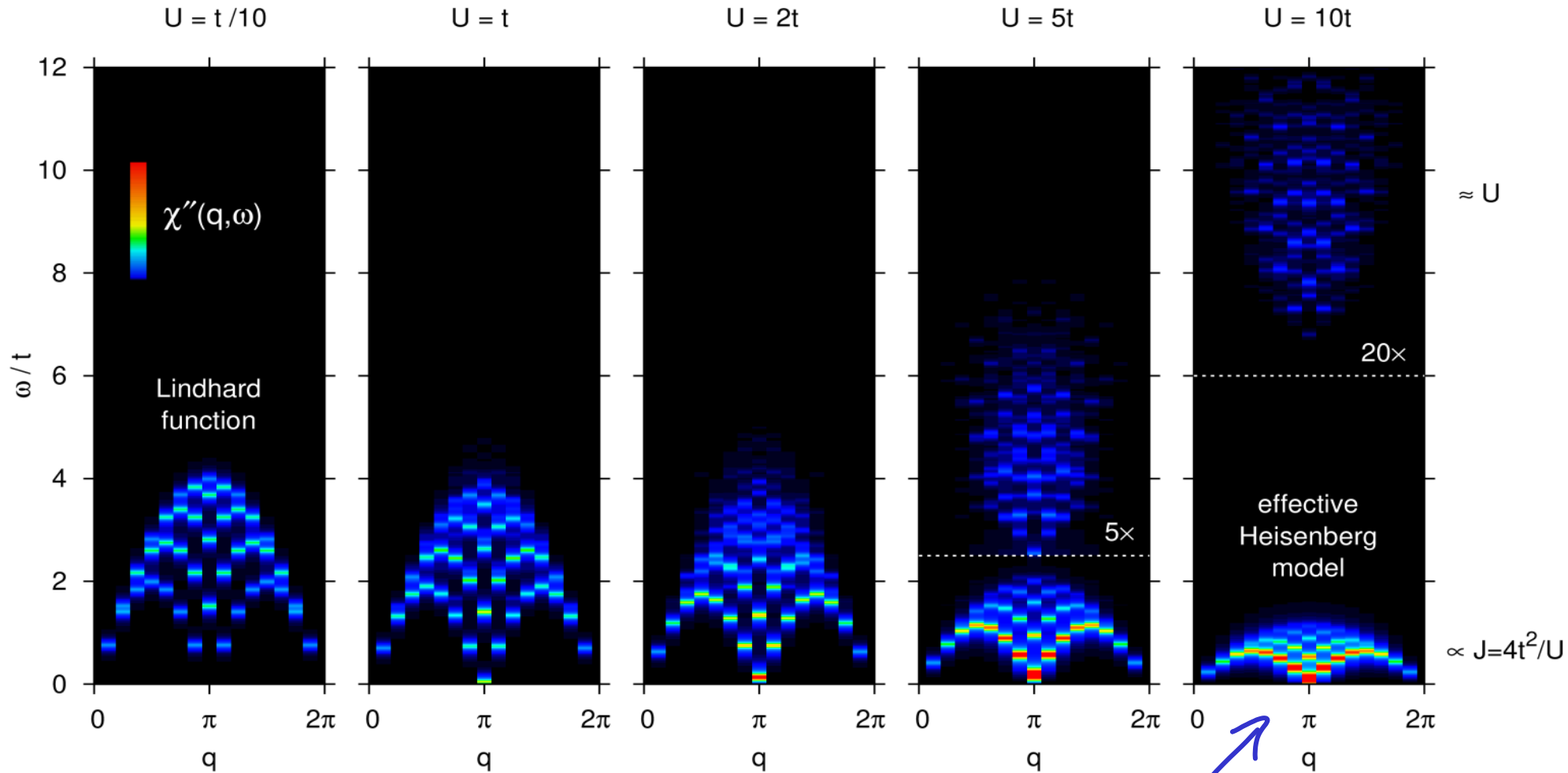


• spinové excitace (spinové vlny, magnony)

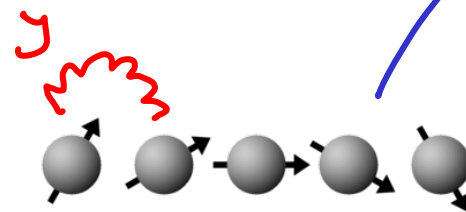
vlnová délka $\lambda = 2\pi/q$



Zrod spinového systému

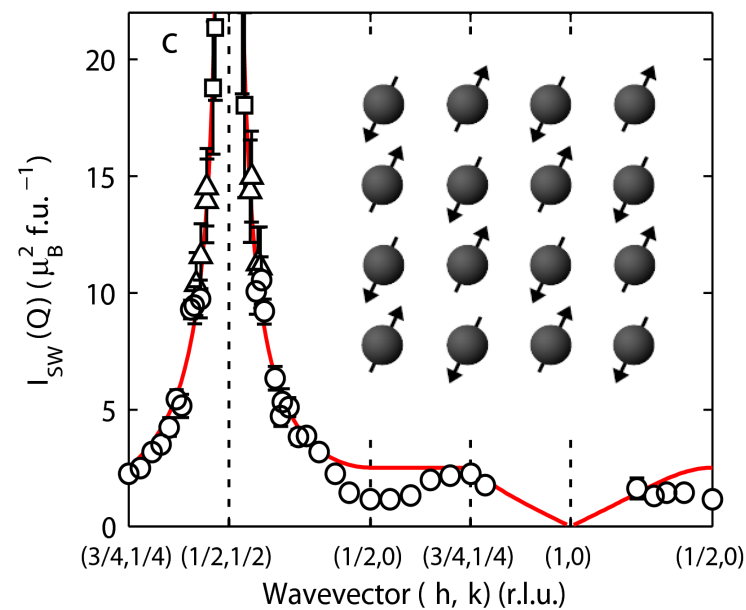
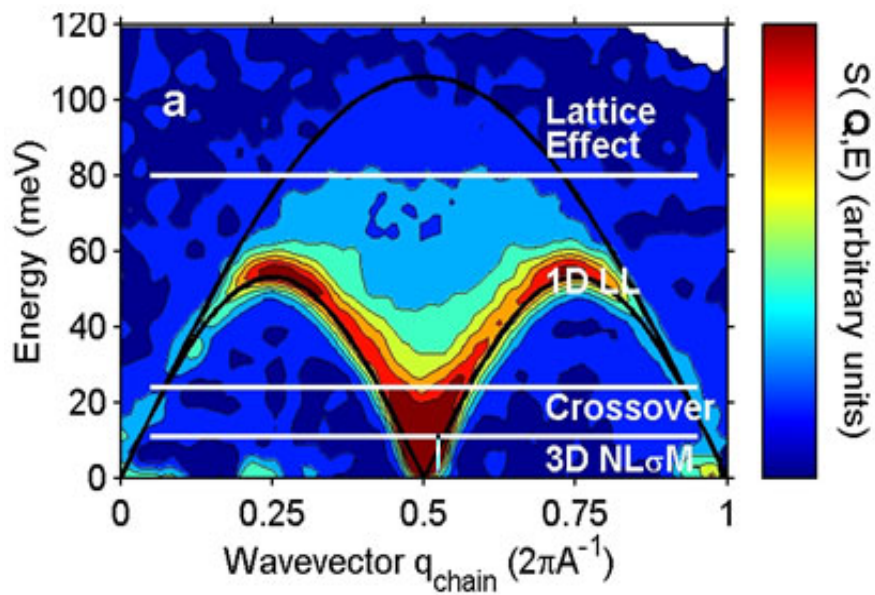
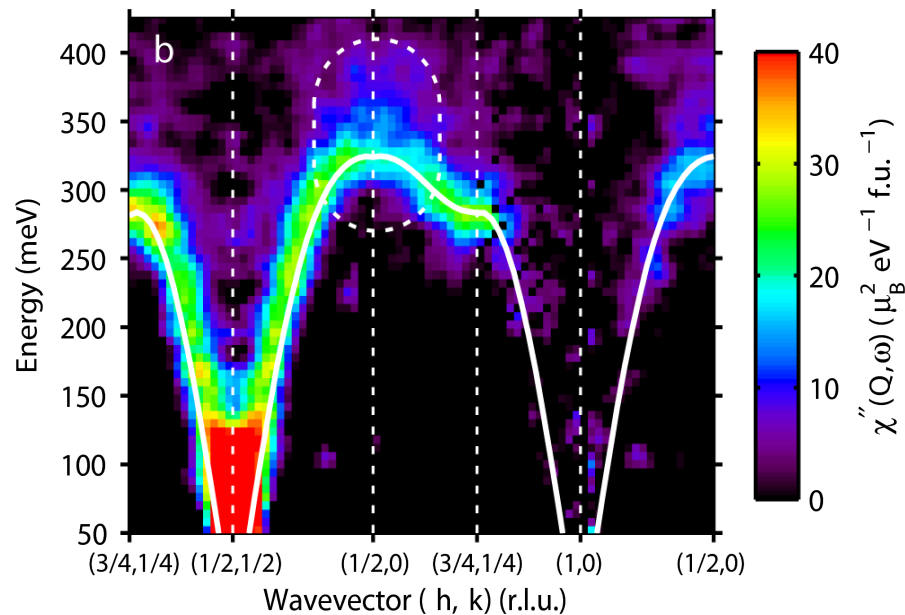
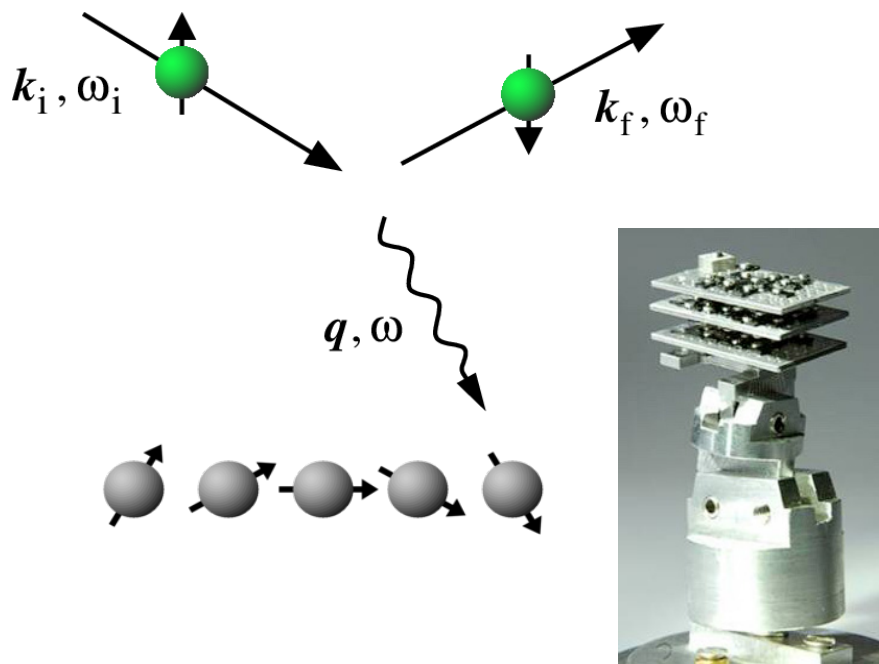


odezva nekorel.
 elektronů na
 mag. vlnu

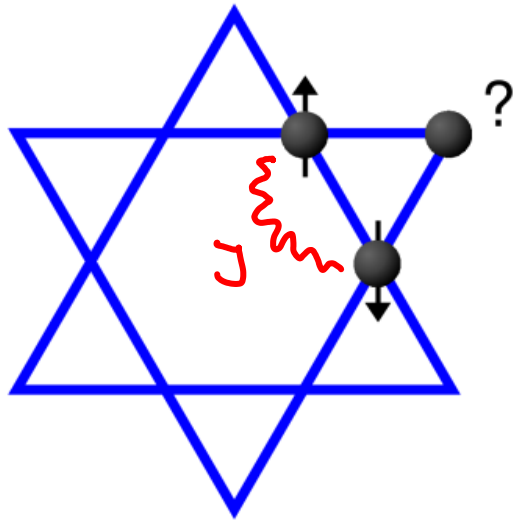


magnony ef.
 spinového
 modelu

Experimentální zkoumání spinových systémů

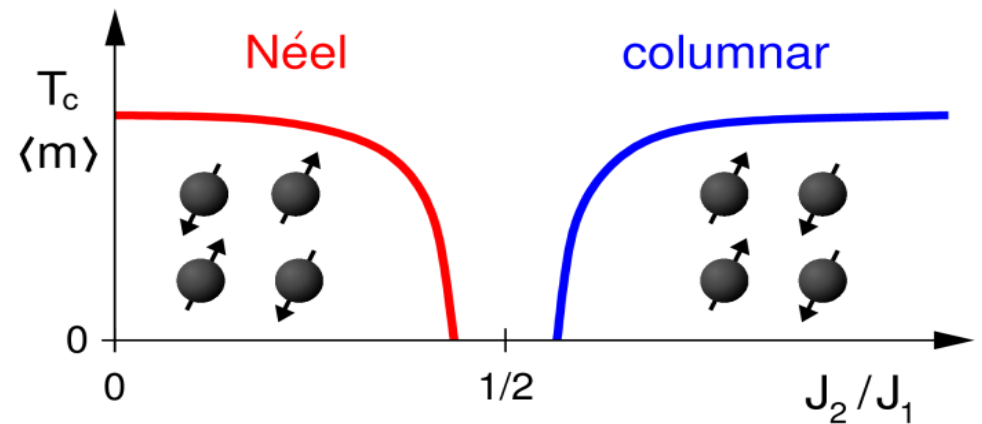
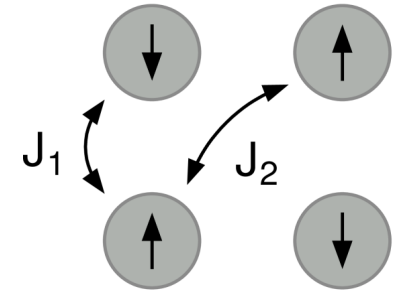


Frustrované spinové systémy



1. geometrická frustrace

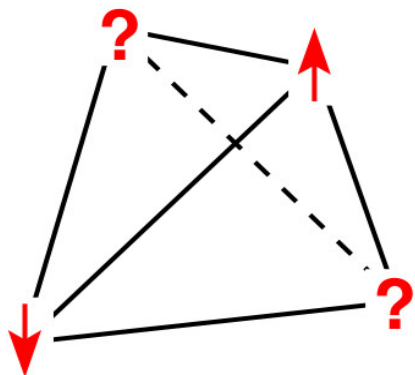
2. frustrace
soupeřících
interakcí



Frustrace umocňuje kvantové projevy

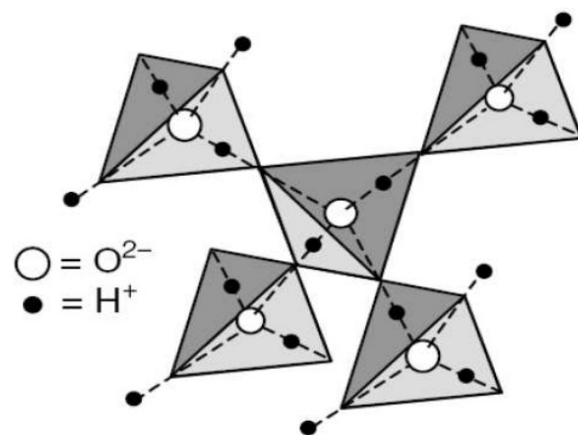
- systém chce být v jednom okamžiku v superpozici mnoha soupeřících stavů

Spinový led

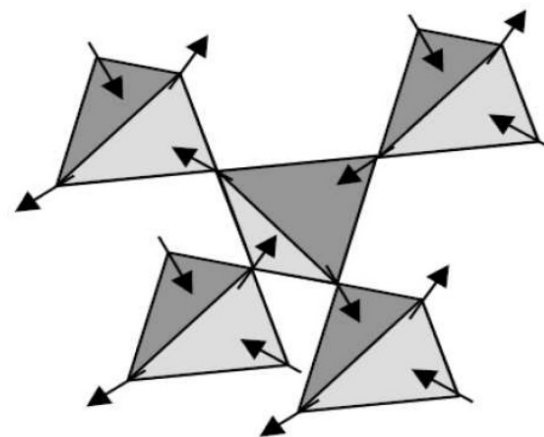


frustrace spinů umístěných v rozích teatradru

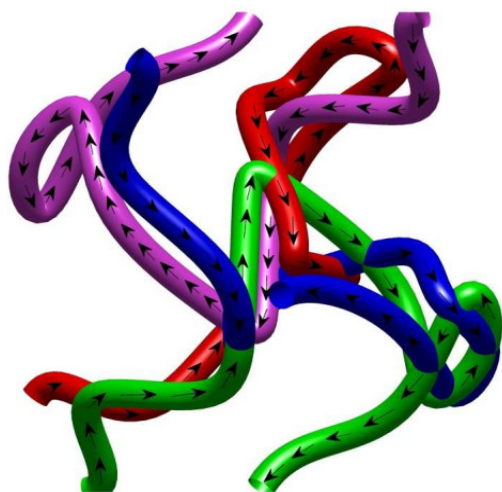
protony v H_2O ledu



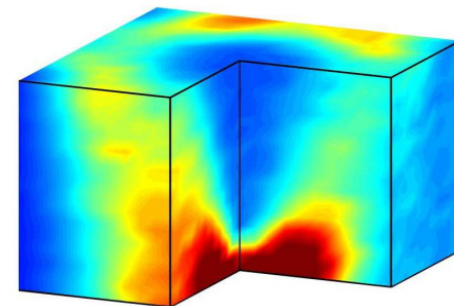
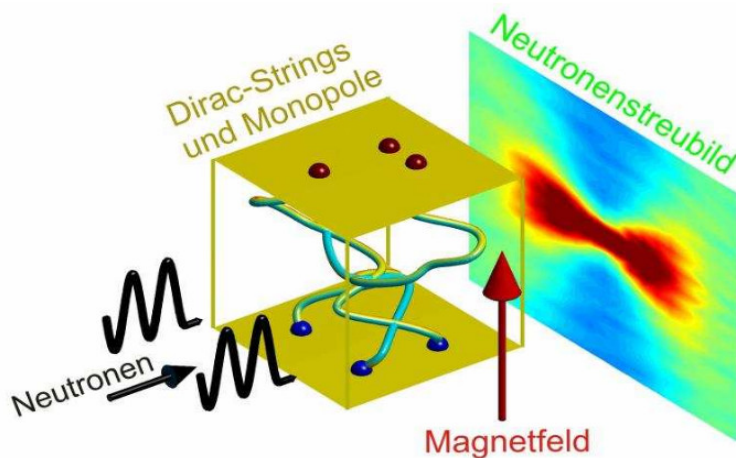
spiny v $Dy_2Ti_2O_7$



$2^N (6/16)^{N/2}$ možnosti' \sim (něco)^N



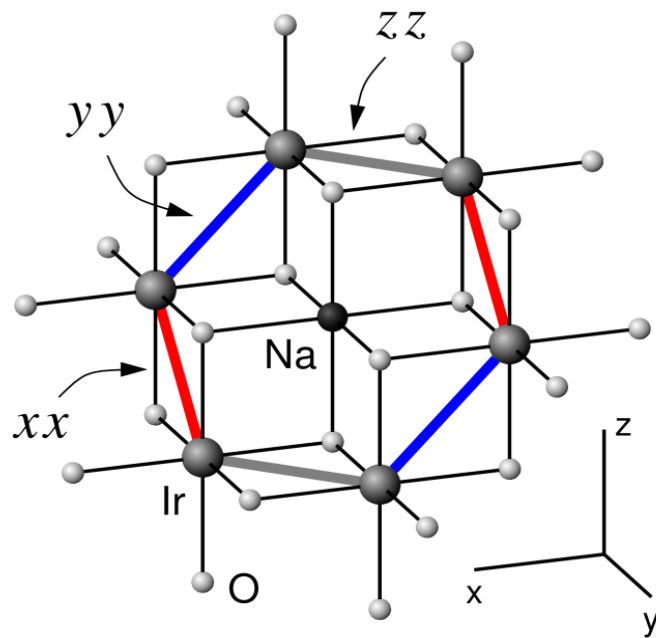
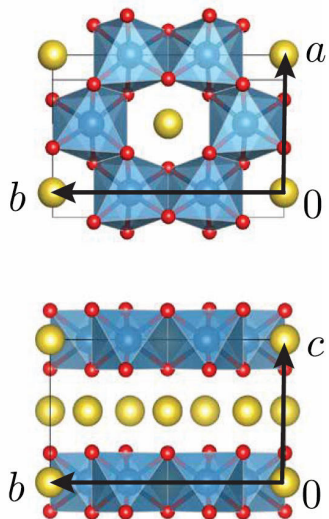
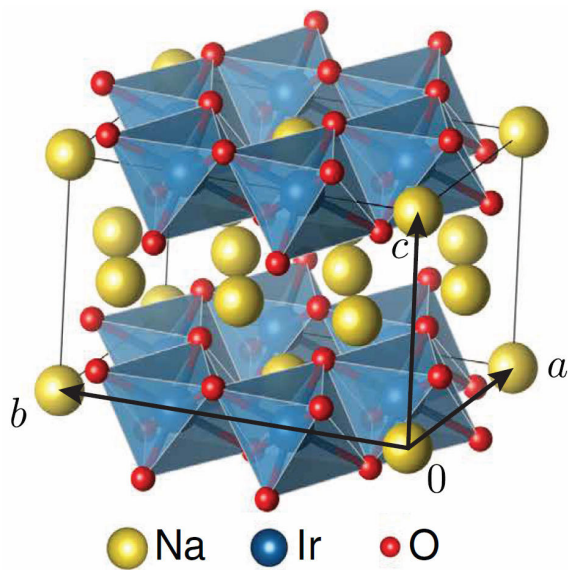
spinové špagety tvořené posloupností vhodně orientovaných spinů



při neutronovém rozptylu zanechávají spinové špagety otisk v intenzitě (vlevo – schéma experimentu, vpravo – simulovaná intenzita rozptylu)

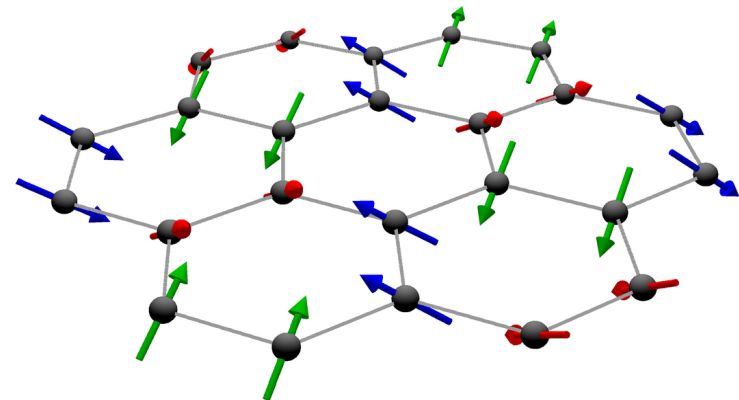
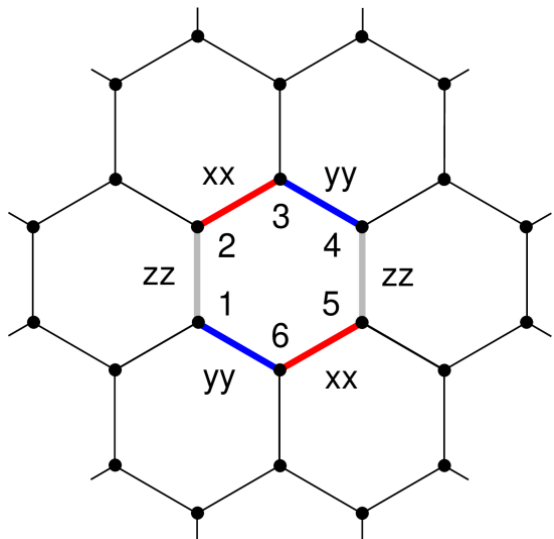
Spinová kapalina

Na_2IrO_3



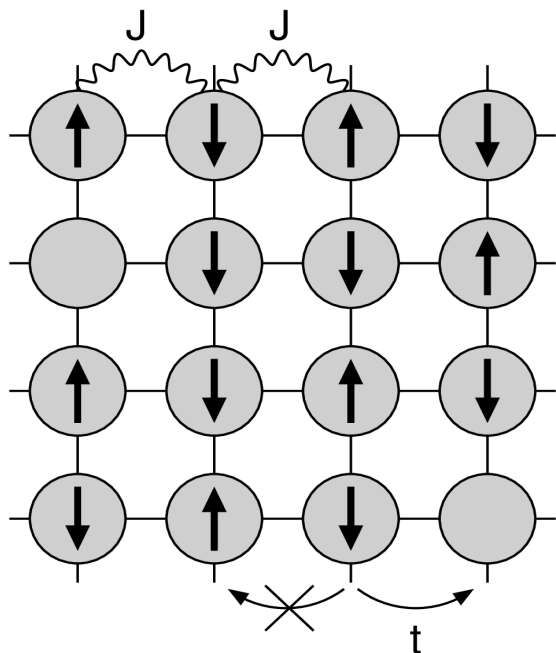
Kitaevův model

– nejnižší energii má stav zvaný spinová kapalina =

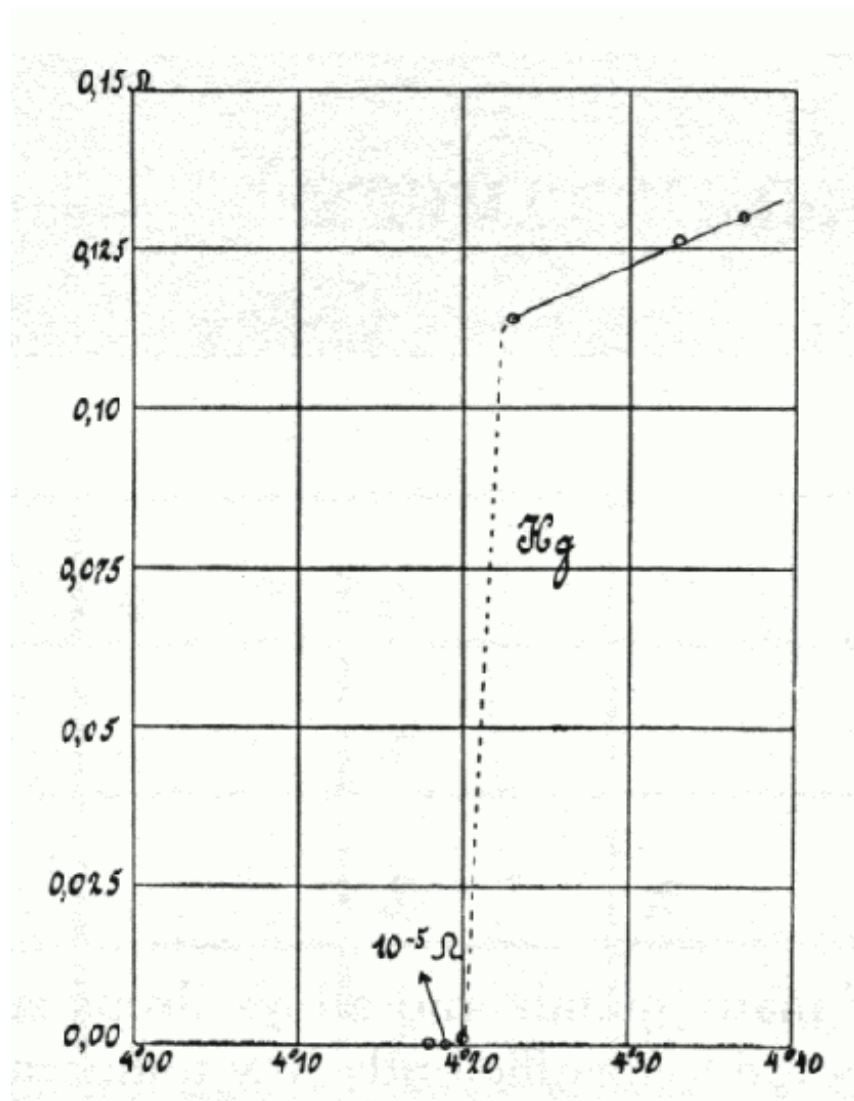


+ mnoho dalších příspěvků

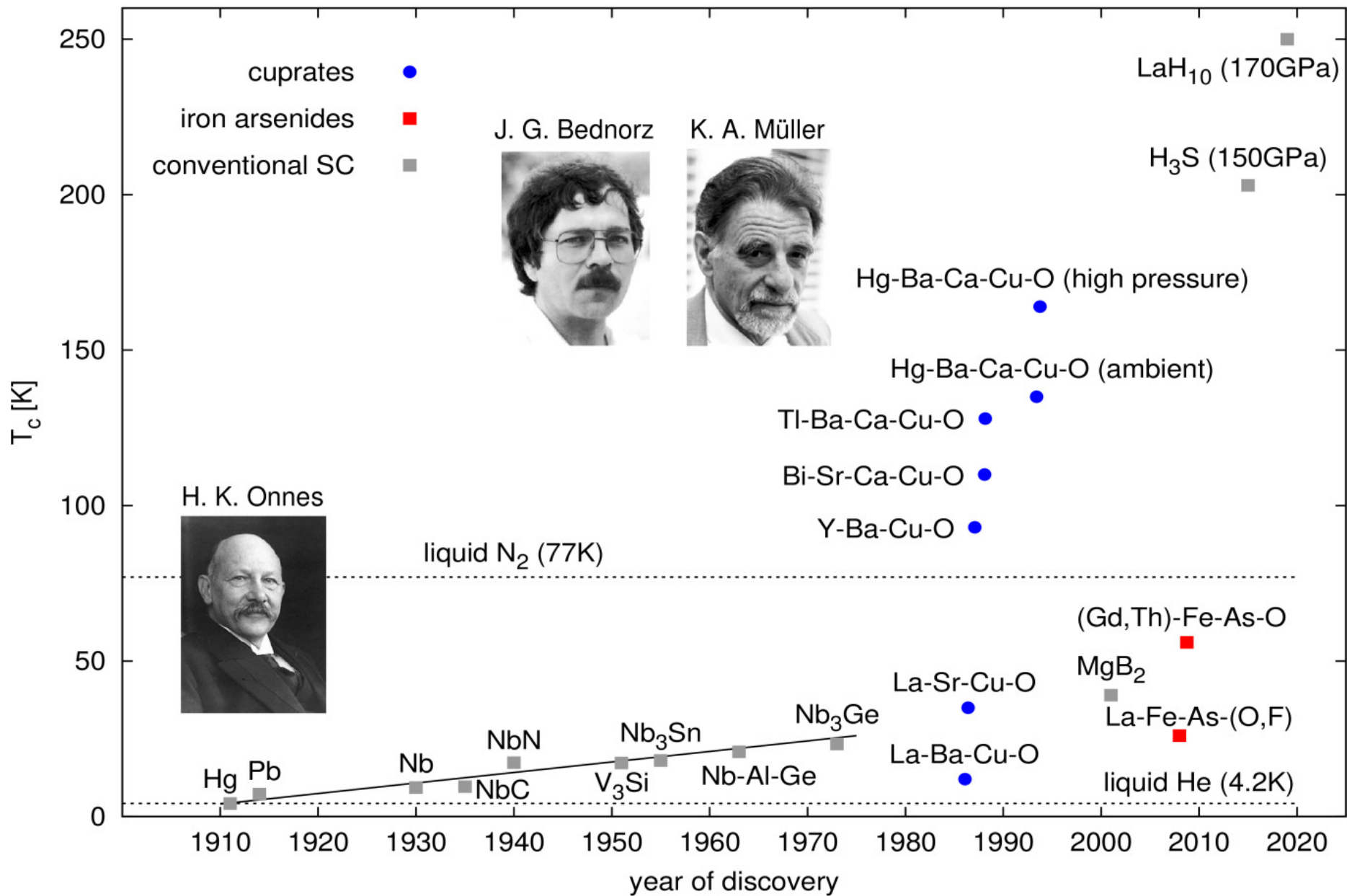
Dopovaný Mottův izolant - vysokoteplotní kuprátové supravodiče



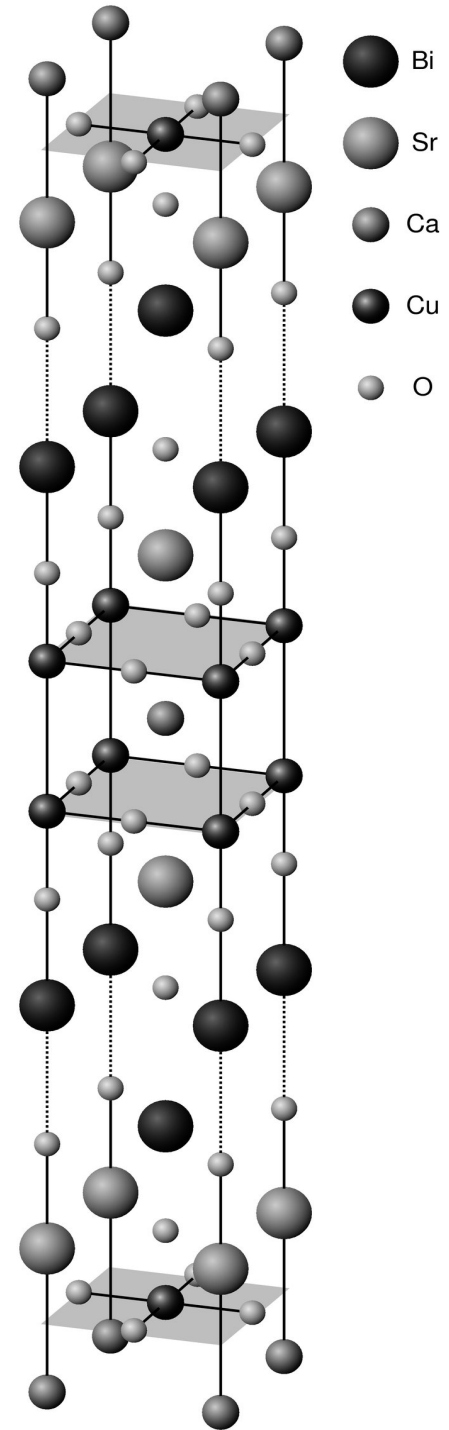
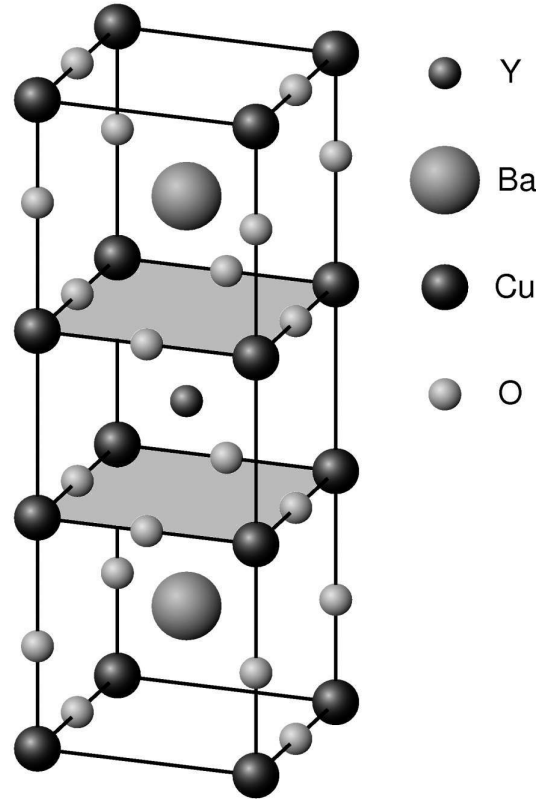
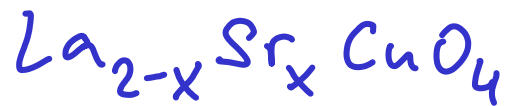
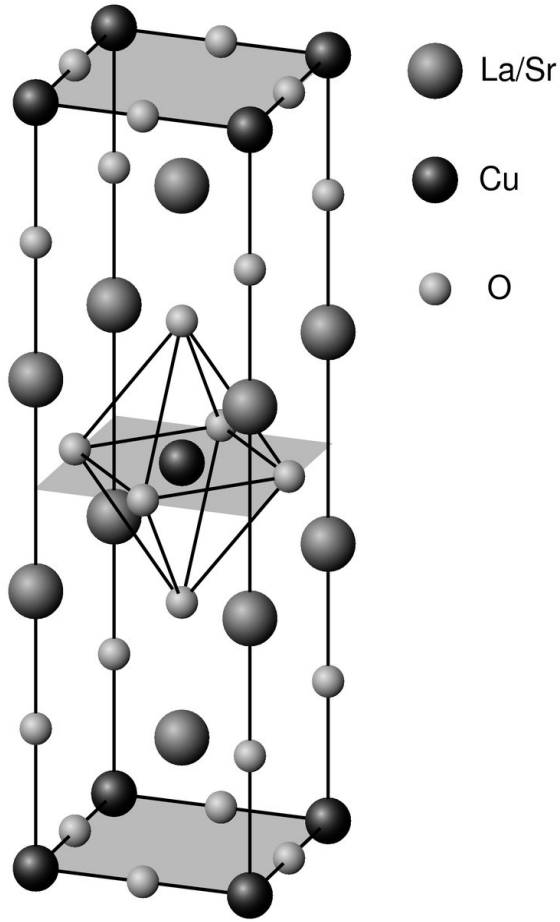
$\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$		$T_c = 38 \text{ K}$
$\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$	LSCO	$T_c = 37 \text{ K}$
$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$	YBCO, Y-123	$T_c = 93 \text{ K}$
$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$	BSCCO, Bi-2212	$T_c = 92 \text{ K}$
$\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+x}$	Hg-1223	$T_c = 138 \text{ K}$



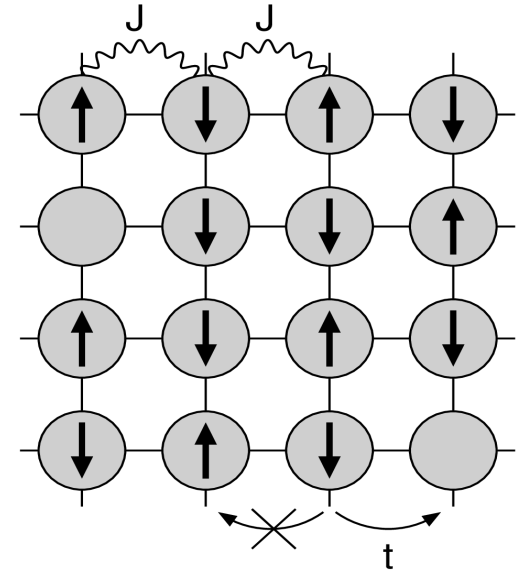
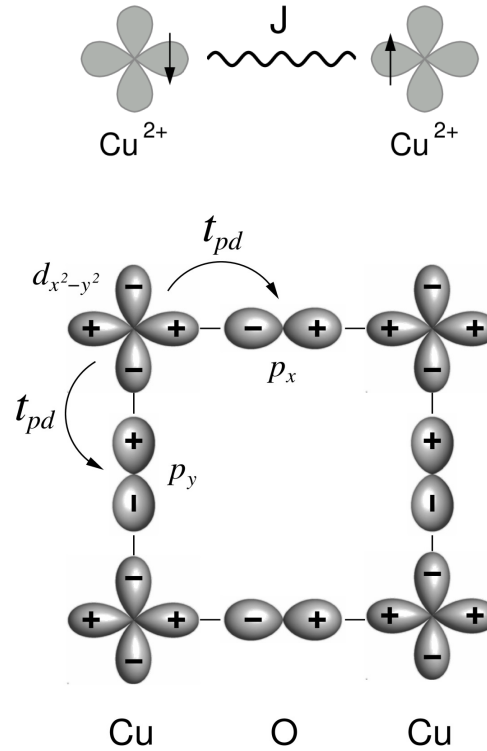
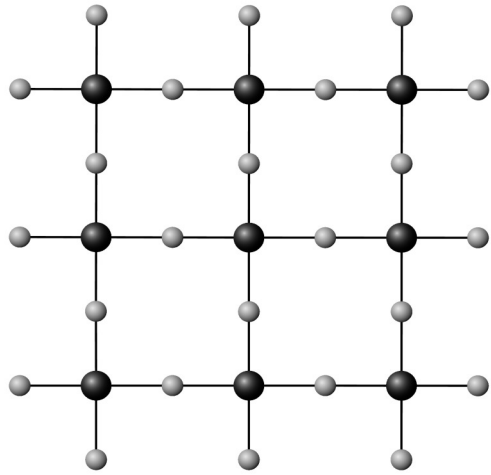
Heike Kamerlingh Onnes (1911)



Krystalová struktura kuprátových supravodičů



Roviny měd-kyslík jako centra dění



$3d^{10}$

$3d^9$

$3d^8$

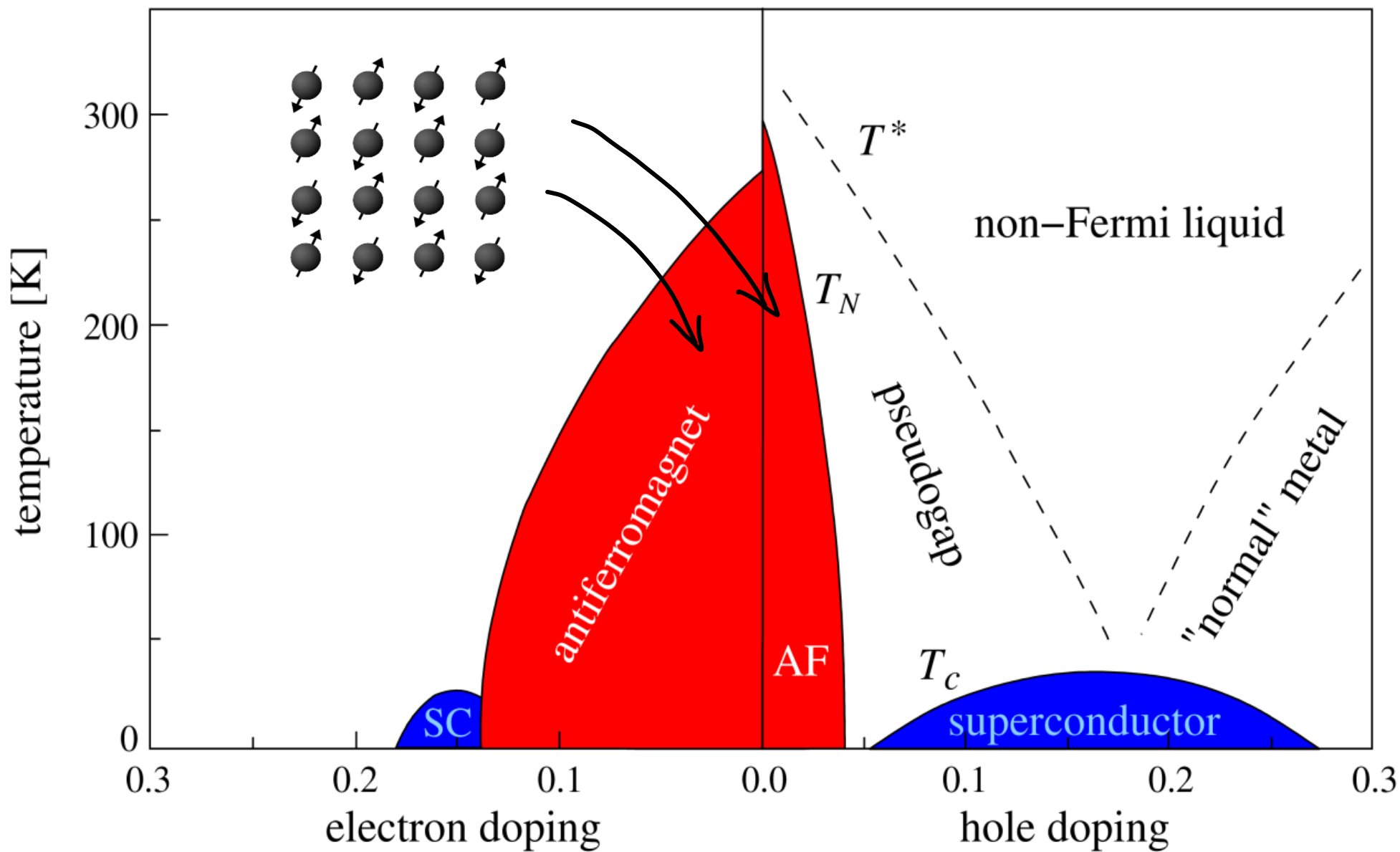
dopovaňi' elektrony

nedopovaný

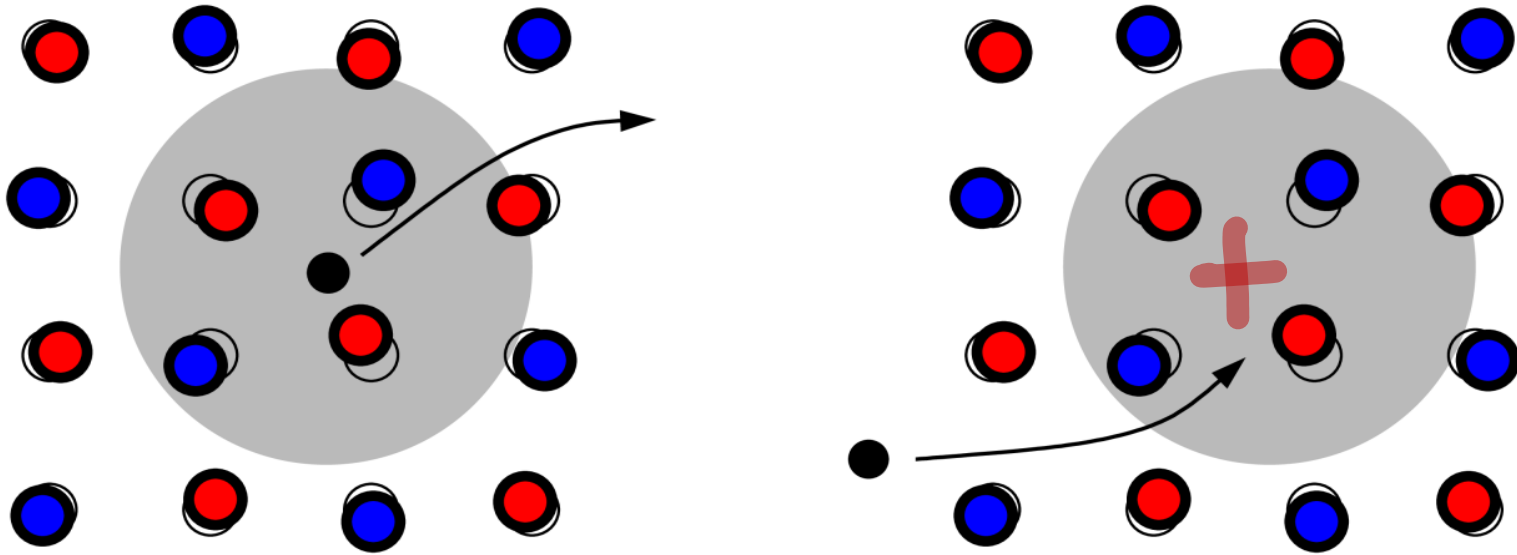
dopovaňi' děrami



Fázový diagram

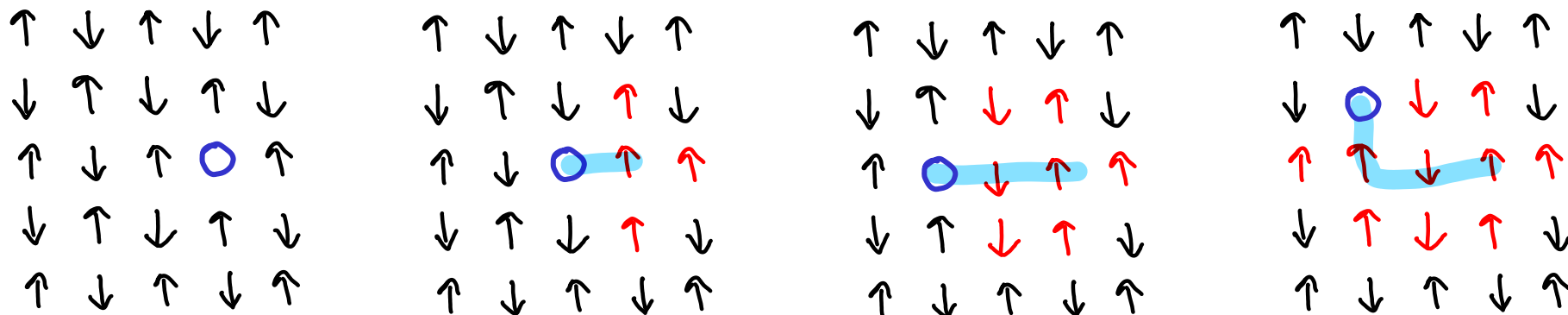


Základ supravodivosti - párování elektronů

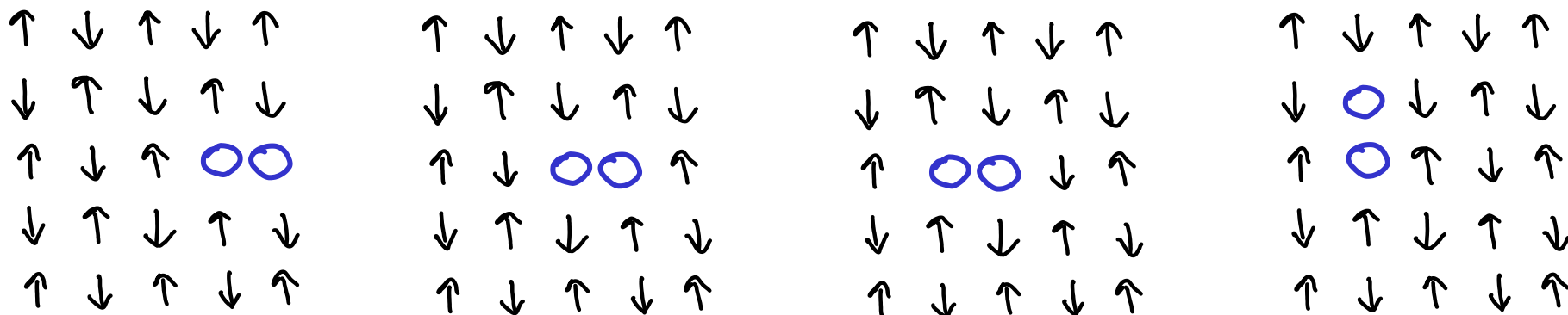


- 1) první elektron deformuje mříž coulombovským působením
- 2) elektron je dále pryč a pomalu mříž ještě nezareagovala
- 3) druhý elektron je přitahován k jánce vytvořené prvníím

Párování elektronů v kuprátech - spinový mechanismus?



→ pohyb jednotlivých děr zanechává defekty v mag. uspořádání!



→ pár děr hladce proplová bez tvorby defektů

Aplikace v energetice - projekt Ampacity

AmpaCity Installation in Essen

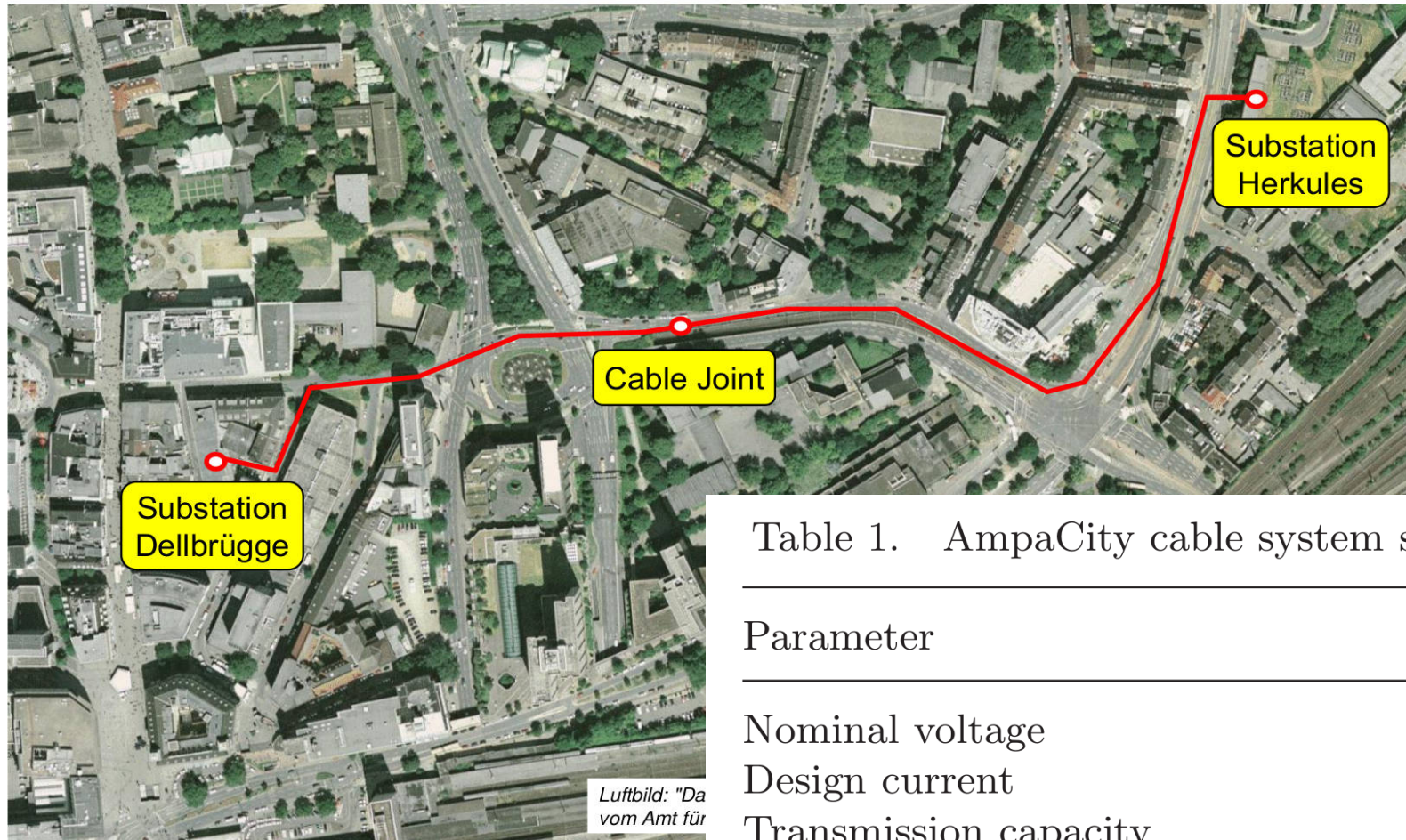


Table 1. AmpaCity cable system specification.

Parameter	Value
Nominal voltage	10 kV
Design current	2.3 kA
Transmission capacity	40 MVA
Length	1 km
AC withstand voltage	30 kV
Lightning impulse voltage	75 kV



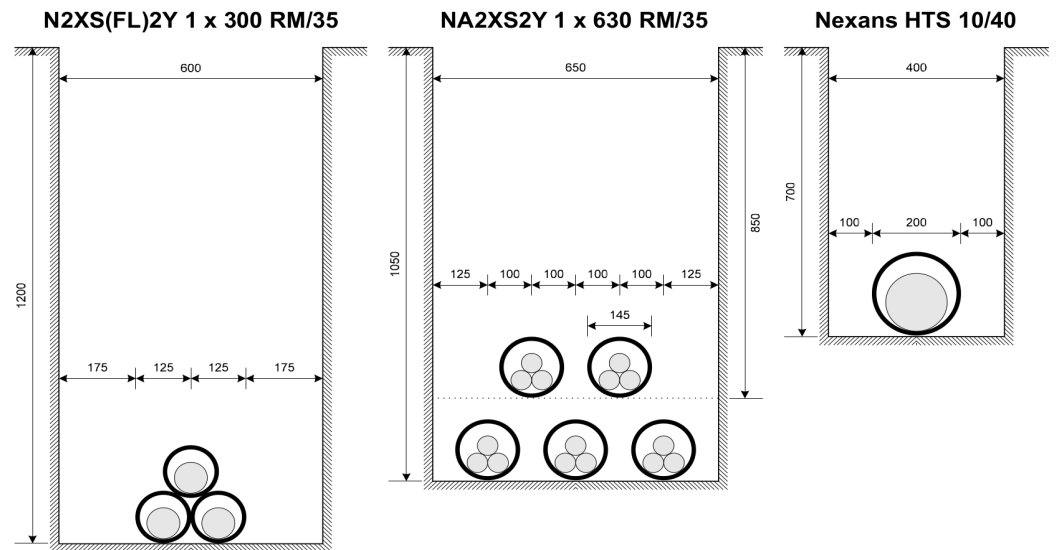
elektrické vedení
Manhattan 1880



Manhattan 2003

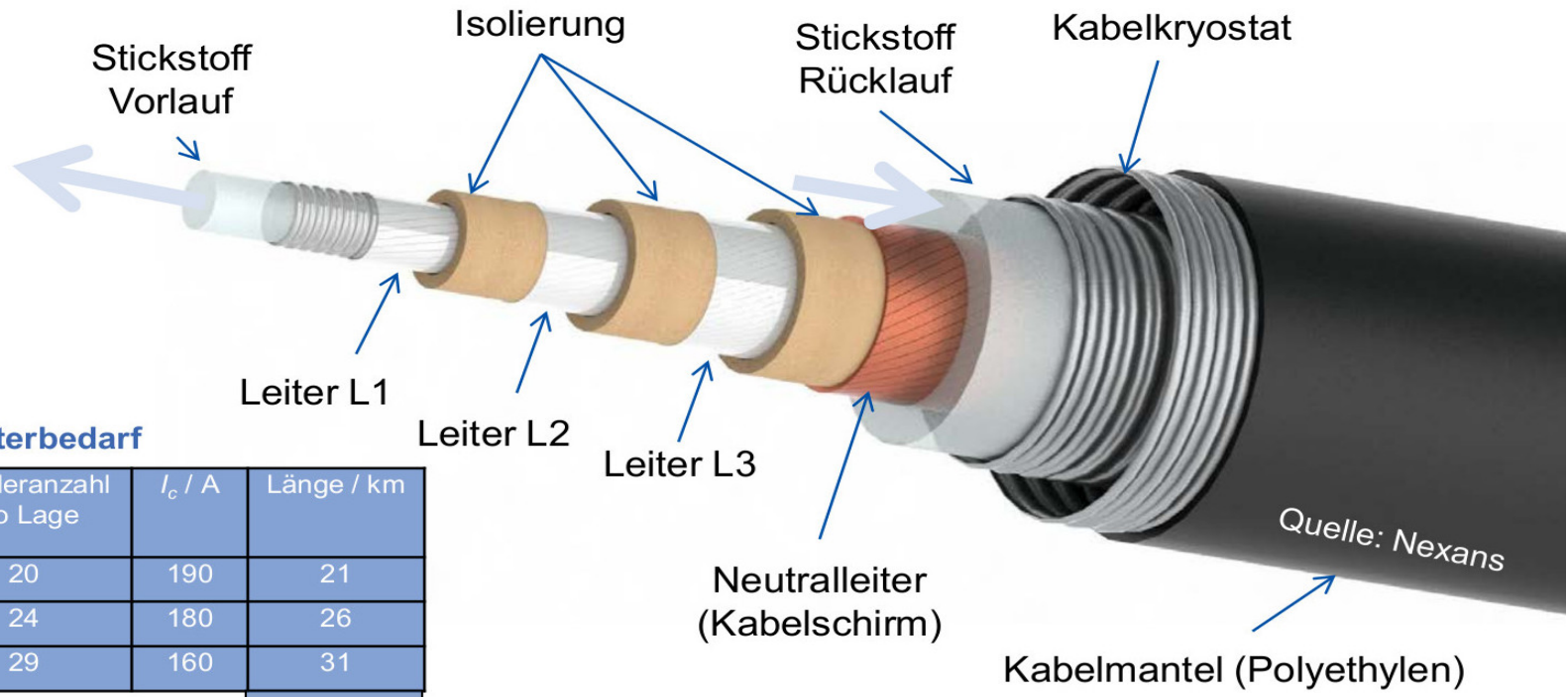
Nexans

ROW and Installation Space



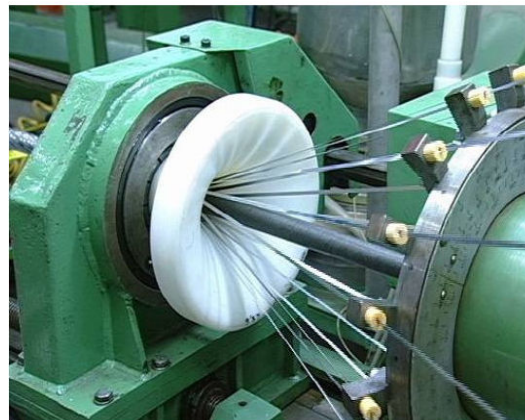
Dauerleistung: 40 MVA
 Nennspannung: 10 kV

Dauerstrom: 2310 A
 Länge: ca. 1 km



BSCCO – Supraleiterbedarf

	Bänderanzahl pro Lage	I_c / A	Länge / km
Leiter 1/Lage 1	20	190	21
Leiter 2/Lage 1	24	180	26
Leiter 3/Lage 1	29	160	31
			→ 78 km



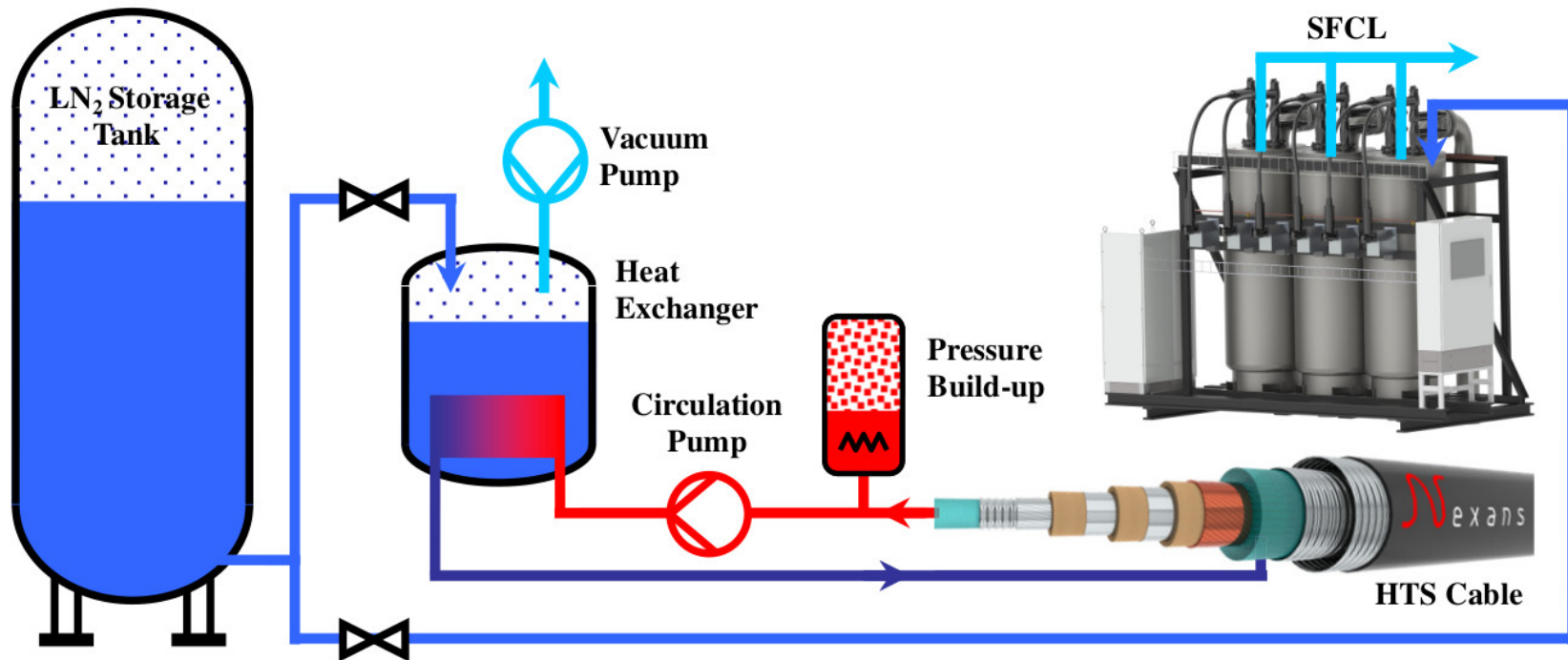


Fig. 4. Schematic of cooling system for AmpaCity HTS cable and fault current limiter.

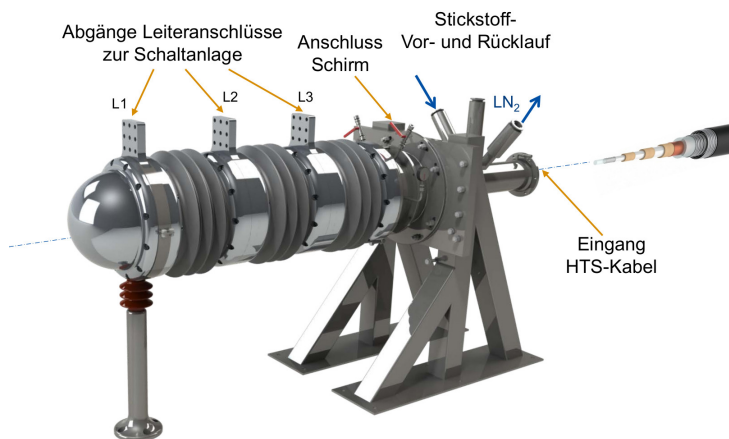




Fig. 5. Type test setup with prototype cable, terminations and joint.



Fig. 6. Pulling of the first cable length from the joint bay to substation Dellbrügge.

Installation in Substation Dellbrügge



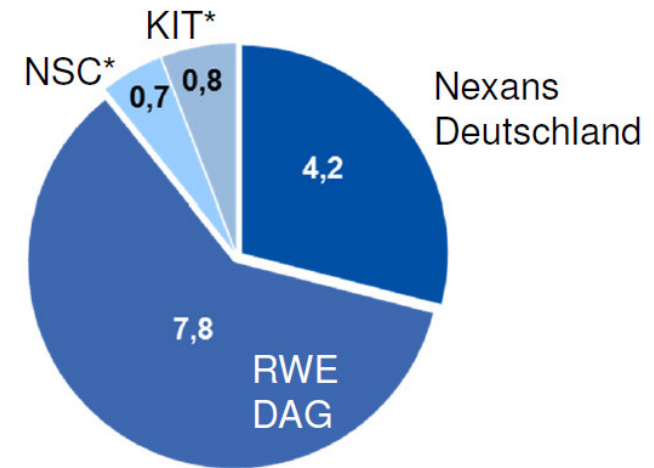
Cooling Down of Cable System December 2013



Die Gesamtkosten des Projekts belaufen sich auf rund 13,5 Millionen Euro

Zahlenangaben in Mio. €

- RWE DAG trägt mit rund 60 % den größten Anteil der Kosten
- Der RWE Anteil von 7,8 Mio. € wird durch Fördermittel des Bundes auf 4,4 Mio. € reduziert
- Projektspezifischer Entwicklungsaufwand liegt bei 2,8 Mio. € und wird von der Nexans-Gruppe getragen



- Kabel, Endverschlüsse
- Strombegrenzer
- Kühlanlage
- Tiefbau, IH&Wartung
- Personalkosten

* NSC: Nexans SuperConductors
KIT: Karlsruher Institut für Technologie

