

Název práce: Elektronická struktura a magnetické vlastnosti materiálů se silnými elektron-elektronovými korelacemi

Autor: Maxim Tchaplianka

Katedra: Fyzikální ústav Akademie věd České republiky

Vedoucí disertační práce: Ing. Alexander B. Shick, CSc., DSc., Fyzikální ústav Akademie věd České republiky

Abstrakt: V práci popisujeme několik výpočetních metod studia magnetických materiálů, které následně aplikujeme na vybrané reálné materiály. Teorie funkcionálu hustoty kombinovaná s exaktní diagonalizací příměsového modelu je použita ke zkoumání tří případů kobaltového atomu zabudovaného v krystalové mříži nebo adsorbovaného na povrchu jiného přechodového kovu. Pro každou z těchto příměsí jsou vypočteny různé fyzikální charakteristiky včetně její spektrální hustota. Dále jsou zkoumány sloučeniny FeHfSb a  $\text{UFe}_{10}\text{Si}_2$  jako potenciální magneticky tvrdé materiály, a to prostřednictvím výpočtů jejich magnetokrystalické anizotropie a termodynamické stability.

Klíčová slova: teorie funkcionálu hustoty, Andersonův model příměsí, přesná diagonalizace, magnetická anizotropie, Kondo efekt