

Prof. dr hab. Maciej M. Maśka
Zakład Fizyki Teoretycznej
Instytut Fizyki
Uniwersytet Śląski

Katowice, 25.08.2017

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr. Krzysztofa Bieniasza p.t.:
“Spin and Orbital Polarons in Strongly Correlated Systems”

Opiniowana rozprawa doktorska została wykonana w Zakładzie Kwantowej Teorii Wielu Ciał Instytutu Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego pod kierunkiem prof. dr. hab. Andrzeja Olesia. Dotyczy ona - zgodnie ze słowami autora - „teorii polaronów spinowych i orbitalnych; t.j. kwazicząstek powstających przez oddziaływanie z magnetycznym lub orbitalnym porządkiem dalekozasięgowym”. Mieści się więc w szerokim nurcie kwantowych obliczeń własności wielociałowych układów z nietrywialnymi fazami. Napisana jest w języku angielskim. Składają się na nią dwie zasadnicze części („Preliminaries” oraz „Results”), każda obejmująca po trzy rozdziały. Praca zawiera także rozdział prezentujący motywację wyboru tematyki badań, podsumowanie, dwa dodatki i spis literatury zawierający 134 pozycje. Łącznie 118 stron. Podstawą rozprawy jest sześć publikacji, których doktorant jest współautorem: trzy prace opublikowane w Physical Review B oraz trzy artykuły w materiałach z konferencji w Zakopanem, Poznaniu i Karpaczu, opublikowane w Acta Physica Polonica A. We wszystkich tych publikacjach doktorant jest pierwszym autorem, natomiast ostatnim jest jego promotor.

Problem układów z silnie skorelowanymi elektronami jest bardzo trudny. Istnieje jedynie bardzo niewielka liczba wyników dokładnych. Ponieważ energia oddziaływań jest w nich porównywalna z energią kinetyczną elektronów, nie można w tych układach znaleźć małego parametru, względem którego można by przeprowadzić rachunek zaburzeń. Ze względu na obecność silnych korelacji metody opierające się na przybliżeniu średniego pola stają się mało użyteczne. W wielu wypadkach pozostają więc jedynie metody numeryczne, przy czym one także mają poważne ograniczenia. Ze

względem na eksponencjalnie szybki wzrost rozmiaru przestrzeni Hilberta przy zwiększaniu rozmiarów układu, metody wykorzystujące dokładną diagonalizację można użyć jedynie dla bardzo małych układów. Z kolei w obliczeniach bazujących na kwantowych metodach Monte Carlo niesławny problem *znaku fermionowego* ogranicza ich stosowalność w niskich temperaturach. Wiele innych metod, jak na przykład *Density Matrix Renormalization Group*, dobrze działają jedynie w układach jednowymiarowych. Powyższy opis problemów obliczeniowych ma na celu pokazanie, z jak trudnym zagadnieniem przyszło się zmierzyć doktorantowi przy realizacji recenzowanej pracy. Przytoczone wyżej trudności objawiają się z pełną mocą już w przypadku układów, w których mamy do czynienia jedynie z ładunkowymi i spinowymi stopniami swobody, jak np. jednopasmowy model Hubbarda czy model t - J . Tymczasem w badanych w rozprawie modelach uwzględnione zostały dodatkowo stopnie swobody orbitalne.

Jak już zostało wspomniane, pierwsza część rozprawy to wprowadzenie („*Preliminaries*”). Zajmuje ono prawie połowę merytorycznej części rozprawy, ale rozumiane jest dość szeroko i obejmuje nie tylko typowy wstęp do zagadnień, które są tematem rozprawy, ale także omówienie używanych modeli i metod obliczeniowych. Rozpoczyna się ono od ogólnej charakterystyki skorelowanych izolatorów, w których brak przewodnictwa nie wynika z zapełnienia pasm, a z oddziaływań kulombowskich. One to bowiem są badane w rozprawie. Wyjaśniony tam został mechanizm Motta-Hubbarda oraz omówiona struktura elektronowa typowa dla tych układów. Następnie doktorant szczegółowo przedstawia dwa układy, które dla których obliczenia są tematem rozprawy. Pierwszy układ, a właściwie cała grupa, to nadprzewodniki wysokotemperaturowe z płaszczyznami miedziowo-tlenowymi. Omówienie fizyki tych związków rozpoczyna się od wprowadzenia modelu trójpasmowego. Dalej następuje analiza niskoenergetycznych procesów i wyprowadzany jest efektywny hamiltonian, który w granicy silnego oddziaływania przyjmuje postać modelu t - J . Rozdział kończy się dyskusją dynamiki dziur wprowadzanych do układu, także w przybliżeniu, w którym pomijane są poprzeczne składowe spinu (model t - J_z). Kolejna część pierwszego rozdziału „*Preliminaries*” poświęcona jest układom, w których występuje uporządkowanie orbitalne. W szczególności doktorant koncentruje się tu na perowskicie KCuF_3 . Jest to bardzo ciekawy układ wykazujący uporządkowanie zarówno orbitalne, jak i mag-

netyczne. W podrozdziale tym dyskutowana jest jego struktura krystaliczna oraz źródła wspomnianych uporządkowań.

Rozdział drugi zawiera szczegółowy opis modeli badanych w rozprawie. Jego pierwsza część poświęcona jest modelowi t - J , włącznie z często pomijanym wyrazem trójwęzłowym. Wprowadzana jest tam reprezentacja klasycznych operatorów fermionowych przez bezspinowe fermiony oraz niewolnicze bozony opisujące zlokalizowane spinowe stopnie swobody. Dalej podobnie wyprowadzany jest efektywny model spinowo-orbitalny dla KCuF_3 . Oczywiście, ze względu na dodatkowe orbitalne stopnie swobody, obliczenia są tu znacznie bardziej zawile. Między innymi elektrony reprezentowane w tym wypadku są nie przez iloczyn dwóch, ale trzech operatorów, gdzie dodatkowy operator odpowiedzialny jest za wzbudzenia orbitalne. Prócz pełnego trójwymiarowego modelu, jest tam przedstawiony efektywny model w którym elektrony uwięzione są w płaszczyźnie, będący orbitalnym odpowiednikiem modelu t - J .

Trzeci, ostatni rozdział pierwszej części rozprawy, zawiera opis metod obliczeniowych używanych w stosunku do wcześniej wprowadzonych modeli. Rozpoczyna się on od przypomnienia podręcznikowej wiedzy dotyczącej metod opartych o funkcje Greena i równanie Dysona. Następnie doktorant demonstruje użycie samozgodnego przybliżenia Borna (*Self-Consistent Born Approximation*, SCBA), polegającego na uwzględnieniu wszystkich nieprzecinających się diagramów, do modeli t - J oraz modelu orbitalnego ograniczonego do dwóch wymiarów. Opis kończy się dyskusją roli pominiętych diagramów z przecinającymi się liniami. Następna część tego rozdziału, na pewno jedna z ważniejszych w recenzowanej rozprawie, prezentuje wariacyjne przybliżenie funkcji Greena (*Variational Approximation*, VA) w zastosowaniu do badanych modeli polaronowych. Zaproponowana tu metoda obliczeniowa, oparta na równaniach ruchu funkcji Greena, została przedstawiona między innymi w bardzo ciekawej pracy opublikowanej w *Phys. Rev.* **94**, 085117 (2016), gdzie otrzymane wyniki zostały porównane nie tylko z wynikami otrzymanymi w ramach SCBA, ale także *Variational Cluster Approximation*. Zaproponowane podejście pozwala w systematyczny sposób badać propagację dziury w modelu orbitalnym z orbitalami e_g . Zaletą VA jest m.in. to, że działa ona w przestrzeni rzeczywistej, a więc w przeciwieństwie do SCBA

dopuszcza zlokalizowane wzbudzenia bozonowe, które nie posiadają symetrii translacyjnej. Większa część opisu dotyczy oddziaływań w granicy Isinga, natomiast pod koniec doktorant dyskutuje rolę fluktuacji kwantowych. Ponieważ przy wzroście liczby bozonów niezbędny do rozwiązania układ równań bardzo szybko rośnie, opracowany został program komputerowy pozwalający na automatyzację procesu generowania równań. Przykłady zastosowania przedstawione są w dodatku B. Niestety, z opisu niewiele można się dowiedzieć o działaniu programu, bo przykłady te nie są uzupełnione wyjaśnieniami dotyczącymi reprezentacji stanów w programie (np., wbrew słowom Autora nie jest jasne, że $[0\ 0] \times [((0, 0), [e'])]$ oznacza stan z jednym elektronem). Także nazwa SAGE (*Sage is an Analytical Green's function Evaluator*) pewnie nie jest najszcześliwsza ze względu na kolizję z popularnym system o tej samej nazwie (*System for Algebra and Geometry Experimentation*), który najprawdopodobniej mógłby być również wykorzystany do obliczeń tego samego typu.

Druga część rozprawy, „Results”, pokazuje efekty zastosowania opisanych wcześniej podejść do trzech różnych układów: (i) czysto spinowego modelu nadprzewodników wysokotemperaturowych, (ii) czysto orbitalnego modelu płaszczyzn $KCuF_3$, oraz (iii) zagadnienia polaronu w pełnym trójwymiarowym spinowo-orbitalnym modelu $KCuF_3$. Głównym wynikiem we wszystkich tych przypadkach są funkcje spektralne, które doktorant oblicza wzdłuż linii łączących punkty o wysokiej symetrii w strefie Brillouina i na ich podstawie dyskutuje rolę poszczególnych czynników w fizycznym obrazie zachodzących procesów [w (iii) dodatkowo badana jest m.in. energia własna].

Pierwszy rozdział drugiej (Rozdział 4.) część zawiera porównanie SCBA i VA dla modelu t - J w różnych granicach i może być traktowany jako miejsce testowania VA poprzez odniesienie do wyników uzyskanych dobrze ugruntowanym podejściem opartym o SCBA. Ze względu na naturę metody VA szczególnie istotne jest pytanie o jej zbieżność. Pierwsze testy dotyczą modelu t - J_z , w którym VA w trzecim rzędzie daje lekką delokalizację kwazicząstek, co oczywiście nie ma miejsca w SCBA, a zbieżność widma osiągana jest w okolicach rzędu piątego. Analiza kształtu powstałej dyspersji wskazuje, że owa delokalizacja związana jest tworzeniem ścieżek Trugmana, które

wymagają co najmniej trzech bozonów. Dalej analizowany jest pełny model t - J , gdzie już w drugim rzędzie kwazicząski uzyskują ruchliwość. Wygląda na to, że w tym wypadku stan podstawowy bardzo szybko osiąga zbieżność, natomiast stany wzbudzone dość długo ewoluują przy zwiększaniu rzędu obliczeń. Jakościowo dyspersja stanu podstawowego ma charakter bliski tej z SCBA, choć nie odtwarza globalnego minimum w punkcie $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$. Następnie doktorant używa VA do zbadania roli wyrazów trójwęzłowych w modelu t - J . Wiadomo, że jeden z nich pozwala na poruszanie się dziury w tle antyferromagnetycznym bez wzbudzania magnonów. Dlatego też w najniższym rzędzie to właśnie on jest źródłem dyspersji kwazicząstki, co jest dobrze widoczne w otrzymanych funkcjach spektralnych. W kolejnych rzędach fluktuacje spinowe dopuszczają mobilność nawet bez tego wyrazu, więc jego rola maleje. Dzieje się tak zwłaszcza w pełnym modelu t - J , gdyż w modelu t - J_z , jak to już wcześniej wspomniano, dyspersja bez wyrazu trójwęzłowego jest bardzo mała.

Kolejny rozdział (Rozdział 5.) dotyczy dwuwymiarowego czysto orbitalnego modelu $KCuF_3$. Większość rozdziału poświęcona jest wersji isingowskiej, a dopiero w końcowej jego części dyskutowane są fluktuacje orbitali. Ponieważ w modelu tym elektron nie jest uwięziony przez antyferromagnetyczne tło i może podążać za chmurą bozonów, doktorant oczekiwał, że VA będzie tu lepiej pracowało niż w modelu t - J . I rzeczywiście, wyliczone funkcje spektralne przy pięciu bozonach bardzo dobrze zgadzają się z wynikami SCBA i to nie tylko dla stanu podstawowego, ale także dla nisko leżących wzbudzeń. Ze względu na systematyczny charakter VA, doktorant był w stanie zbadać wpływ różnych czynników na funkcje spektralne. W szczególności chodzi tu o przestrzenne ograniczenia nałożone na swobodne propagatory oraz o rolę diagramów z przecinającymi się liniami, które nie są uwzględnione w SCBA. Okazuje się, że wpływ diagramów z przecięciami jest znikomy, co wydaje się zrozumiałe jeśli spojrzy się na podobieństwo funkcji spektralnych otrzymanych w ramach VA i SCBA. Z drugiej strony wyniki pokazują istotną rolę wspomnianych wyżej ograniczeń (nie jestem przekonany, czy sposób prezentacji na rysunku 5.6 jest najlepszy do porównania poszczególnych przypadków). Ostanía część rozdziału zawiera dyskusję pominiętych w obliczeniach fluktuacji orbitali. Okazuje się, że uwzględnienie fluktuacji niewiele zmienia spektralne własności kwazicząstek (szkoda, że nie ma obrazka

prezentujące zestawienie wyników z fluktuacjami i bez nich). Podsumowując ten rozdział, wydaje się, że VA bardzo dobrze pracuje dla czysto orbitalnego modelu KCuF_3 (choć stwierdzenie „*We have seen that the variational method converges very rapidly, so that the results are reliable already around the the 4-orbiton mark...*” wydaje się być nieco na wyrost, jako że zbieżność jest warunkiem koniecznym, ale nie zawsze wystarczającym).

Ostatni rozdział części prezentującej wyniki (Rozdział 6.) jest moim zdaniem najważniejszą i najbardziej wartościową częścią rozprawy. Przedstawione są tam wyniki dla efektywnego trójwymiarowego spinowo-orbitalnego modelu KCuF_3 . Oczywiście w tym wypadku przestrzeń jest rozpinana przez magnony i orbitony, co znacznie podnosi złożoność obliczeniową. Można przypuszczać, że znacznie trudniej tu o osiągnięcie zbieżności. Niestety, mimo stosunkowo bogatej dyskusji wyników uzyskanych w podprzestrzeniach o różnych maksymalnych liczbach poszczególnych wzbudzeń (zwłaszcza w podrozdziale 6.1), nie udało mi się znaleźć jednoznacznej odpowiedzi czy używane w obliczeniach maksymalne rozmiary przestrzeni zapewniają zbieżność, czy nie. Niemniej wyniki pokazują bardzo ciekawy efekt sprzężenia pomiędzy spinowymi i orbitalnymi stopniami swobody, prowadzący do pojawienia się polaronu. Pokazane zostało także jak zmiana wartości oddziaływania modyfikuje względną rolę obu rodzajów wzbudzeń w formowaniu tego stanu. W tym względzie ciekawa jest tu także analiza energii własnej, pokazująca efekty związane z różną wymiarowością sprzężeń z poszczególnymi rodzajami wzbudzeń. Część z zaprezentowanych w tym rozdziale wyników została opublikowana *Phys. Rev. B* **95**, 235152 (2017).

Przechodząc do ogólniejszej oceny recenzowanej rozprawy chciałbym zwrócić uwagę na pewien problem. Otóż czytając rozprawę bardzo trudno wydzielić z niej oryginalny wkład doktoranta. Oczywiście fakt, że we wszystkich publikacjach, z których trzy są w czasopiśmie o wysokiej światowej randze, jest on pierwszym autorem, świadczy, że udział ten jest znaczący. Niemniej konstrukcja pracy, w której mieszają się oryginalne wyniki z wynikami opublikowanymi wcześniej powoduje, że recenzent ma bardzo trudne zadanie i cały czas musi odwoływać się do innych publikacji. Na

szczęście praca jest opatrzona bogatym i bardzo dobrze dobranym spisem literatury, co znacznie ułatwia to zadanie.

Po uporaniu się z powyższymi trudnościami mogę stwierdzić, że oryginalny wkład zaprezentowany w pracy jest znaczącym osiągnięciem i z pewnością może być podstawą do nadania Panu mgr. Krzysztofowi Bieniaszowi stopnia doktora nauk fizycznych. Warto też zwrócić uwagę, że uzyskane wyniki w ogromnej mierze są wynikami analitycznymi, a o takie coraz trudniej we współczesnej fizyce, gdzie szybki rozwój mocy obliczeniowych zniechęca do pójścia ścieżką mozolnych ręcznych obliczeń. Tym bardziej zasługują one na docenienie. Pod względem edytorskim praca jest praktycznie bez zarzutu, co przy tak dużej liczbie wyrażen matematycznych nie jest proste do osiągnięcia.

Biorąc pod uwagę rozprawę, a także dorobek doktoranta, można stwierdzić, że wykazał się on bardzo dobrą znajomością w zakresie fizyki teoretycznej materii skondensowanej, w szczególności fizyki wieloorbitalowych układów z silnymi korelacjami, a więc układów dla których trudno prowadzić wiarygodne obliczenia. Rozprawa pokazuje też, że bardzo dobrze opanował aparat matematyczny niezbędny do prowadzenia badań w tym obszarze.

Konkludując stwierdzam, że rozprawa Pana mgr. Krzysztofa Bieniasza w pełni spełnia wymagania zarówno zwyczajowe, jak i te stawiane rozprawom doktorskim w *Ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym*, jednocześnie wnosząc o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Maciej Maśka