

Kraków, dn. 25 sierpnia 2017 r.

dr hab. Przemysław Piekarczyk
Instytut Fizyki Jądrowej
Polskiej Akademii Nauk
ul. Radzikowskiego 152
31-342 Kraków

Recenzja pracy doktorskiej mgr Krzysztofa Bieniasza
pt. "Spin and Orbital Polarons in Strongly Correlated Electron Systems"
wykonanej pod kierunkiem prof. dr hab. Andrzeja M. Olesia
na wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Uniwersytetu Jagiellońskiego

Praca doktorska mgr Krzysztofa Bieniasza dotyczy teoretycznych badań układów silnie skorelowanych z uporządkowaniem spinowym i orbitalnym. Rozprawa składa się z dwóch głównych części. Pierwsza podzielona jest na trzy rozdziały, które zawierają podstawowe informacje o badanych układach, stosowanych modelach i metodach obliczeniowych. Druga część przedstawia wyniki dla trzech badanych układów: (1) układu spinowego, jakim są płaszczyzny miedziowo-tlenowe, (2) dwuwymiarowego układu orbitalnego i (3) trójwymiarowego układu spinowo-orbitalnego czyli kryształu KCuF_3 . Ostatni rozdział zawiera podsumowanie wyników. Dodatkowo rozprawa zawiera krótkie wprowadzenie, gdzie nakreślone są główne motywacje prowadzonych badań, dwa uzupełnienia (Appendix A i B) oraz listę referencji (134 prace).

Badania teoretyczne przedstawione w rozprawie dotyczą dwóch rodzajów materiałów: nadprzewodników wysokotemperaturowych, których charakterystycznym elementem są płaszczyzny miedziowo-tlenowe oraz związku miedziowo-fluorowego KCuF_3 posiadającego strukturę perowskitu. Własności tych materiałów opisane są w pierwszym rozdziale, który zawiera jednocześnie podstawowe informacje o układach silnie skorelowanych jakimi są

izolatory Motta-Hubbarda i izolatory typu transferu ładunku. Przedstawiony materiał został właściwie wybrany i stanowi dobry wstęp do dalszych rozdziałów. Do pełniejszego obrazu brakuje schematu diagramu fazowego nadprzewodników wysokotemperaturowych z krótkim opisem najważniejszych faz. Pozwoliłoby to odnieść przedstawione w rozprawie wyniki badań do konkretnej fazy tych materiałów. W drugim rozdziale opisano dwa główne modele rozważane w rozprawie: model t-J dla płaszczyzn miedziowo-tlenowych i trójwymiarowy model spinowo-orbitalny. Dodatkowo drugi z tych modeli rozważany jest w uproszczonej wersji orbitalnej 2D, która jest odpowiednikiem modelu spinowego t-J. Do wszystkich modeli zastosowano metodę niewolniczych bozonów, w której spinowe stopnie swobody (bozony) są odseparowane od fermionowych. Kolejny rozdział przybliży szczegóły metod obliczeniowych stosowanych w rozprawie: formalizm funkcji Greena, samozgodne przybliżenie Borna i metodę wariacyjną, która jest podstawową metodą stosowaną w pracy. Jest to zasadniczo podejście analityczne, które uwzględnia efekty wielociałowe i pozwala kontrolować dokładność obliczeń. Oprócz rozmiaru bazy, głównym przybliżeniem są więzy nałożone na rozmiar chmury bozonów, co prowadzi do lokalnego charakteru oddziaływań.

Najważniejszą wielkością analizowaną w pracy jest funkcja spektralna, czyli część urojona funkcji Greena, wyliczana dla układów z domieszkowanym ładunkiem, który oddziałuje ze wzbudzeniami spinowymi i orbitalnymi. Takie złożone kwazicząstki nazywane są polaronami. Funkcja spektralna zawiera pełną informację o stanie podstawowym i spektrum energetycznym wzbudzeń polaronu. Wyliczone są z niej relacje dyspersyjne pasm i wagi spektralne kwasicząstek. Wszystkie te wielkości wyznaczono wzdłuż kierunków wysokiej symetrii w pierwszej strefie Brillouina. Dla modelu t-J i dwuwymiarowego modelu orbitalnego, funkcja spektralna wyliczana jest metodą wariacyjną w kolejnych rzędach przybliżenia, co kontrolowane jest liczbą bozonów (od 1 do 5) oraz w przybliżeniu Borna. W obydwu przypadkach porównano obliczenia dla pełnego modelu, który uwzględnienia fluktuacje kwantowe z wynikami otrzymanymi w granicy Isinga. Taki sposób prezentacji dał możliwość zbadania stosowanych przybliżeń do obydwu modeli, jak również pokazania zasadniczych różnic własności obu układów. Przykładowo, w modelu orbitalnym, wpływ fluktuacji kwantowych na własności polaronowe jest znacznie słabszy niż w modelu spinowym i obydwie metody dają bardzo zbliżone wyniki. Dla modelu t-J dodatkowo zbadano wpływ wyrazów trójwęzłowych, które opisują przeskoki elektronu obejmujące trzech najbliższych sąsiadów w układzie domieszkowanym. W przypadku modelu orbitalnego otrzymano wyniki dla dwóch różnych wartości oddziaływania wymiennego J . Mam uwagę dotyczącą porównywania wyników z różnych obliczeń, które bardzo często prezentowane są

na różnych stronach rozprawy. Do porównania wyników bardzo pomocne byłyby dodatkowe rysunki np. stanu podstawowego wyliczonego z uwzględnieniem i bez fluktuacji kwantowych lub rysunek pokazujący wyniki dla podstawowego modelu t - J i z przeskokami trójwęzłowymi.

Rozdział 6 prezentuje wyniki dla pełnego modelu spinowo-orbitalnego otrzymane metodą wariacyjną w granicy Isinga. W tym przypadku elektron oddziałuje jednocześnie z dwoma rodzajami bozonów: magnonami i orbitonami. Rozważane są dwa stany orbitalne o bardzo różnych własnościach polaronowych. Oprócz stanu "orbital-flop", który rozważany był wcześniej w modelu orbitalnym, drugim to stan Kugela-Khomskii'ego, w którym orbitale na sąsiednich węzłach ustawione są prostopadle. Powoduje to lokalizację elektronów i brak dyspersji stanów polaronowych. Bardzo ciekawe są wyniki dla stanów pośrednich pomiędzy dwoma rozważanymi porządkami orbitalnymi, które pokazują ciągłe przejście między stanem zlokalizowanym i mobilnym (Rys. 6.7 i 6.10 dla dwóch różnych wartości J). W tym rozdziale dyskutowany jest jeszcze efekt oddziaływania Hunda na funkcje spektralne polaronów.

Wyniki przedstawione w rozprawie doktorskiej oceniam bardzo wysoko. Głównym osiągnięciem jest rozszerzenie metody wariacyjnej funkcji Greena i zastosowanie jej do opisu stanów polaronowych w układach z uporządkowaniem spinowym i orbitalnym. Wyznaczone funkcje spektralne pozwoliły zbadać dynamikę polaronów i porównać ich własności osobno w układzie z porządkiem spinowym i orbitalnym. Dużym osiągnięciem pracy jest zbadanie polaronów sprzężonych jednocześnie z magnonami i orbitonami. Pokazano, że charakter stanu polaronowego może zmieniać się między dwoma skrajnymi postaciami w zależności od wartości całki wymiany J : polaron orbitalny (małe J) lub spinowym (duże J). Jednak obliczenia dla modelu spinowo-orbitalnego nie uwzględniają fluktuacji spinowych, więc nie mogą być traktowane jako ostateczne, co podkreślone jest w podsumowaniu pracy. Z porównania obliczeń dla modeli spinowych i orbitalnych wynika, że fluktuacje kwantowe w sektorze spinowym są bardziej istotne. Nasuwa się więc pytanie, czy możliwe jest zastosowanie tej metody z uwzględnieniem kwantowych fluktuacji spinowych, a jednocześnie potraktowanie orbitalnych stopni swobody w granicy Isinga? Drugie moje pytanie dotyczy możliwości rozszerzenia tej metody na układy z dwoma fermionami i zbadania oddziaływania między polaronami w układach spinowo-orbitalnych (stany bipolaronowe).

Praca napisana jest bardzo dobrym i klarownym językiem. Drobne literówki są nieliczne (np. Haisenberg na str. 18). Rysunki wykonane są starannie i są dobrze opisane. Dodatkowe rysunki, o których wspomniałem wcześniej mogłyby rozszerzyć analizę porównawczą wyników i uzupełnić informacje zawarte w rozprawie.

W mojej opinii rozprawa doktorska mgr Krzysztofa Bieniasza zawiera bardzo szeroki, dobrze opracowany materiał badawczy oraz stanowi znaczny wkład do badań układów silnie skorelowanych z porządkiem spinowym i orbitalnym. Większość przedstawionych w rozprawie wyników została opublikowana w trzech artykułach: dwie prace w Physical Review B i jedna w Acta Physica Polonica A (ogólnie mgr Krzysztof Bieniasz jest współautorem 6 publikacji). Uważam, że rozprawa spełnia wymagania stawiane pracom doktorskim i wnoszę do Rady Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego o dopuszczenie mgr Krzysztofa Bieniasza do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

dr hab. Przemysław Piekarczyk



Wniosek o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr Krzysztofa Bieniasza
pt. "Spin and Orbital Polarons in Strongly Correlated Electron Systems"

Wnoszę do Rady Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr Krzysztofa Bieniasza pt. "Spin and Orbital Polarons in Strongly Correlated Electron Systems" wykonanej pod kierunkiem prof. dr hab. Andrzeja M. Olesia. Mój wniosek uzasadniam bardzo wysokim poziomem badań przeprowadzonych w ramach pracy doktorskiej. Wyniki zaprezentowane w pracy doktorskiej stanowią bardzo ważny wkład do badania stanów polaronowych w układach silnie skorelowanych elektronów z porządkiem spinowym i orbitalnym. W rozprawie doktorskiej rozwinięto metodę wariacyjną funkcji Greena i pokazano, że to podejście może być z sukcesem stosowane do złożonych układów fermionów sprzężonych z magnonami i orbitonami. Wyniki dla pełnego modelu spinowo-orbitalnego, są pierwszymi tego typu obliczeniami dla złożonych stanów polaronowych, co świadczy o nowatorskim charakterze badań. Uważam, że praca doktorska mgr Krzysztofa Bieniasza w pełni zasługuje na wyróżnienie.

dr hab. Przemysław Piekarczyk

