



Politechnika Wrocławska

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wrocław, 19 października 2023 r.

dr hab. Jacek Herbrych

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Politechnika Wrocławska

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Piotra Wrzosa pt.

"Nowe spojrzenie na problem pojedynczej dziury w antyferromagnetyku"

Przedłożona rozprawa doktorska ma charakter teoretyczny i porusza problem jednej dziury w tzw. modelu t - J , tj., efektu domieszkowania na antyferromagnetyczne uporządkowanie magnetyczne w niskowymiarowych układach silnie skorelowanych elektronów. Współdziałanie pomiędzy ruchem dziury a antyferromagnetyzmem uważa się za centralne dla kupratów (materiałów na bazie miedzi). Mimo swojej naiwnej prostoty (hamiltonian zawiera tylko dwa człony: kinetyczny t opisujący tunelowanie elektronów między sąsiednimi węzłami sieci krystalicznej oraz człon wymiany J opisujący wymianę spinów między elektronami na tych węzłach), modele t - J i ich rozszerzenia są kluczowe w badaniach teoretycznych w fizyce materii skondensowanej i pomagają lepiej zrozumieć właściwości różnych materiałów, w tym niewyjaśnione od blisko czterdziestu lat właściwości nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego. Choć zaadresowany problem (jednej dziury) nie jest nowy, przedstawiona w dysertacji analiza rzuca nowe światło na to zagadnienie: autor faktycznie *"dotrzymuje słowa"* tezie zawartej w tytule swojej pracy. Wyrażając problem w języku dziur i magnonów (kwazicząstek opisujących kolektywne wzbudzenia spinowe), zamiast standardowego opisu przy pomocy elektronów i spinów, Pan mgr. Piotr Wrzosek pod opieką promotora dra hab. Krzysztofa Wohlfelda wskazuje na szczególną rolę oddziaływania magnon-magnon na właściwości wzbudzeń modelu t - J w jednym i w dwóch przestrzennych wymiarach. W konsekwencji, w mojej ocenie rozprawa w pełni spełnia wymogi formalne stawiane rozprawom doktorskim w odpowiedniej



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wrocławska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434

P



ustawie o stopniach i tytule naukowym. Poniżej przedstawię przegląd wyników uzyskanych przez Doktoranta, ze zwróceniem uwagi na ich wartość merytoryczną.

Przed omówieniem oryginalnych wyników zawartych w pracy, odniosę się do przedłożonej przez Doktoranta rozprawy. Praca została napisana w języku angielskim i składa się z 6 rozdziałów. Wstęp (Rozdział I) zawiera krótki opis fizyki modelu t - J w jednym (1D) i w dwóch (2D) wymiarach oraz opis głównej metody użytej w dysertacji. Rozdziały II-V bazują na dwóch opublikowanych artykułach (Rozdział II na bazie K. Bieniasz, P. Wrzosek, A. M. Oleś, K. Wohlfeld, "From weak to strong hole confinement in a Mott insulator", SciPost Physics **7**, 066 (2019); Rozdział III na bazie P. Wrzosek, K. Wohlfeld, "Hole in the two-dimensional Ising antiferromagnet: Origin of the incoherent spectrum", Physical Review B **103**, 035113 (2021)), jednego preprintu (Rozdział V na bazie P. Wrzosek, A. Kaosiński, Y. Wang, M. Berciu, C. E. Agrapdis, K. Wohlfeld, "The fate of the spin polaron in the 1D antiferromagnet", arXiv:2203.01846) oraz na nieopublikowanych jeszcze wynikach otrzymanych we współpracy z E. Demlerem, A. Bohrdt, oraz F. Grusdtem (Rozdział IV). Pracę wieńczy podsumowanie zawarte w Rozdziale VI. Należy zauważyć, że w dorobku publikacyjnym Pana Wrzoska znajdują się jeszcze dwa inne artykuły, które nie zostały opisane w dysertacji. W mojej ocenie, ogólnym słabym punktem pracy (który będzie wyrażony w pytaniach, na które proszę Doktoranta o odpowiedź w czasie publicznej obrony) jest dysproporcja między technicznymi aspektami obliczeń a przedstawionymi wynikami. Jest to odzwierciedlone już we wprowadzeniu (Rozdział I), gdzie szeroko omawiany w publikacjach i książkach naukowych problem nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego, czy też samych modeli silnie skorelowanych układów elektronów, został opisany w dysertacji zaledwie na kilku stronach, ustępując miejsca szerokiemu opisowi mapowania modelu t - J . Podobnie Rozdziały II-IV są zdominowane przez techniczne szczegóły, pozostawiając niewiele miejsca na wyniki i wnioski (skupiając się głównie na jednocząstkowej funkcji spektralnej). Chciałbym jednak zauważyć, że choć praca miejscami pozostawia niedosyt, Doktorant osiągnął wszystkie cele przedstawione we wprowadzeniu (i. wyjaśnić różnicę w właściwościach modelu t - J między jednym a dwoma wymiarami, ii. zbadać wpływ uporządkowania magnetycznego na fizykę kwazi-jednowymiarowych systemów oraz najważniejszy iii. wyjaśnić rolę oddziaływania magnon-magnon). Wyżej wymieniony słaby punkt pracy wynika





najprawdopodobniej z faktu z jak trudnym (analitycznie i numerycznie) problemem zdecydował zmierzyć się Doktorant.

Rozdział II bazuje na oryginalnych wynikach opublikowanych w SciPost Physics **7**, 066 (2019), których Doktorant jest współautorem. Rozdział ten zawiera wyniki otrzymane dla modelu $t-J^z$ (wariantu modelu $t-J$ gdzie oddziaływanie spinowe ma tylko część Isinga) na sieci Bethego, t.j., na nieskończonym grafie, w którym wszystkie wierzchołki mają taką samą liczbę sąsiadów z . Co ważne dla przedstawionych wyników, sieć Bethego nie zawiera zamkniętych cykli (pętli). Pozwala to na porównanie przypadku $z = 4$ (odpowiadającego dwuwymiarowej sieci) z samozgodnym przybliżeniem Borna (ang. *Self-consistent Born Approximation*; SCBA) w 2D, które również pomija cykliczne oddziaływania. W rozdziale zawarto jeden z głównych wyników pracy, t.j., specjalne znaczenie oddziaływania magnon-magnon charakteryzowanego parametrem λ . W przypadku sieci jednowymiarowej ($z = 2$) pokazano, że "pełne" oddziaływanie $\lambda = 1$ jest wyróżnione spośród innych. Dla dowolnego $\lambda < 1$, system zachowuje się efektywnie jak system bez oddziaływania magnon-magnon. Podobną konkluzję otrzymano w przypadku dwuwymiarowym z użyciem SCBA a także w przypadku $z = 4$: brak oddziaływania magnon-magnon prowadzi do "drabinowego" spektrum - charakterystycznej cechy systemów, w których oddziaływanie magnon-magnon może być zaniedbane. Doktorant opisuje znaczenie zamkniętych pętli (oddziaływania magnon-magnon) w 2D w Rozdziale III.

Rozdział III przedstawia rezultaty zawarte w publikacji Physical Review B **103**, 035113 (2021), której Doktorant jest pierwszym autorem. Moim zdaniem, głównym wynikiem tego rozdziału jest potężna metoda (nazwana self-avoiding walks approximation; SAW) wykorzystana do obliczenia funkcji spektralnych dla 2D systemu z blisko 1000 węzłami. Należy zauważyć, że standardowa metoda dokładnej diagonalizacji pozwala na rozwiązanie problemu na "jedynie" około 30 węzłach. Metoda ta została również wykorzystana w Rozdziale IV. Dzięki SAW Doktorant pokazał jak istotne jest oddziaływanie magnon-magnon. Wyniki pokazane na wykresie 3.10 (strona 50) w połączeniu z przesłaniem zawartym w Rozdziale II jasno pokazują, że do prawidłowego opisu modelu $t-J^z$ w dwóch wymiarach niezbędne jest oddziaływanie magnon-magnon λ . Jest to bardzo ważny



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wrocławska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434

P



wynik i jeden z głównych celów, które postawił sobie Doktorant. Niedogodnością materiału zawartego w tej części pracy jest bardzo techniczny aspekt tego rozdziału. Mimo bogatych ilustracji (które pomagają śledzić dyskusję), rozdział ten wymaga szczególnej uwagi czytelnika. Co więcej, główny wynik, t.j., funkcja spektralna dla dwuwymiarowego modelu $t-J^z$ jest omawiany tylko na dwóch stronach. W związku z powyższym chciałbym zapytać Doktoranta: **(1)** Czy przedstawioną metodę SAW można wykorzystać do liczenia innych funkcji spektralnych (innych funkcji Green'a), np. odpowiedzi spinów? **(2)** Czy metoda (lub jej modyfikacja) pozwala na liczenie funkcji spektralnych w skończonych temperaturach? **(3)** Dlaczego zbieżność danych dla $J/t \lesssim 0.2$ jest trudna do otrzymania (problem często występujący dla wyników opisanych w Rozdziale IV).

W Rozdziale IV opisana jest nowa klasa wzbudzeń jednocząstkowej funkcji spektralnej, tzw., wzbudzenia "obrotowe" (ang. rotational states) w modelu $t-J^z$. Wzbudzenia te bardzo różnią się od "standardowego" spektrum (obserwowanego, np. na sieci Bethego): te ostatnie mają zależność energetyczną $(J/t)^{2/3}$, podczas gdy wzbudzenia "obrotowe" są w przybliżeniu liniowe J/t . Doktorant szczegółowo opisuje właściwości i pochodzenie tych stanów. Do ich analizy wykorzystuje zarówno dokładną diagonalizację, jak i zmodyfikowaną metodę SAW. Na moją wiedzę, istnienie takich wzbudzeń zostało tutaj pokazane po raz pierwszy dla dwuwymiarowego systemu (wcześniej dyskutowano je jedynie w kontekście sieci Bethego).

W ostatnim opisującym oryginalne wyniki, Rozdziale V, bazującym na preprincie arXiv:2203.01846, Doktorant powraca do problemu specjalnej roli oddziaływania magnon-magnon λ , tym razem szczegółowo analizując model $t-J$ oraz $t-J^z$ w jednym wymiarze. W mojej opinii, rozdział ten jako jedyny ma idealną proporcję między omawianiem otrzymanych wyników a technicznymi aspektami obliczeń (zainteresowany czytelnik odesłany jest do technicznej sekcji 5.4, której znajomość nie jest potrzebna do zrozumienia konkluzji rozdziału). Doktorant dokładnie omawia różnice w funkcjach spektralnych między przypadkiem z oddziaływaniem $\lambda = 1$ a jego brakiem $\lambda = 0$. Bardzo ciekawa jest analiza modu obecnego w tym drugim przypadku, t.j., gęstości spektralnej dla fal o długości





$\pi/2 < q < \pi$ w okolicy $\omega \simeq -t$. **(4)** Tutaj, proszę Doktoranta o dodatkowy komentarz do równania (5.5), t.j., do analizy wagi kwazicząstki występującej dla $\lambda = 0$. W jaki sposób $z(L)$ jest otrzymane z numerycznych danych? Czy Doktorant może opisać (choćby jakościowo) zależność z od λ dla, np., krótkich fal $q = \pi$. Ciekawa jest również analiza samego stanu podstawowego przy pomocy trzywęzłowej funkcji korelacji $C(s, d)$ (równanie 5.6), przedstawiona w rozdziale 5.2.1. W tej części, Autor jasno pokazuje jak niestabilny (względem λ) jest jednowymiarowy fenomen rozdzielenia spinu i ładunku (ang. spin-charge separation; SCS). Osiągając kolejny cel, jaki Autor postawił sobie w dysertacji, wyniki pokazują, że odchodząc od "specjalnej" wartości $\lambda = 1$, otrzymać można polarony (znane z systemów 2D). Na stronie 80 Autor pisze "Such a result suggests that taking any $\lambda \neq 1$ breaks a certain symmetry of the system that is necessary for the spin-charge separation to take place". Jednocześnie, w rozdziale 5.3 Doktorant pokazuje, że złamanie symetrii translacji (przez oddziaływanie z innymi łańcuchami) również prowadzi do fizyki polaronów (zamiast fizyki SCS). **(5)** Biorąc pod uwagę równanie 1.24 (modyfikowane oddziaływanie magnon-magnon wyrażone przy pomocy "standardowych" operatorów ładunku i spinu), $\lambda \neq 1$ zawsze prowadzi do złamania symetrii $SU(2)$ (wprowadzając anizotropię $S^z S^z$ w modelu t - J) i do złamania symetrii translacji (człon z przemiennym polem magnetycznym). Proszę doktoranta, by skomentował, czy złamanie obu symetrii jest konieczne do zniknięcia fizyki SCS?

Pracę wieńczy podsumowanie (Rozdział VI), w którym mgr Wrzosek w bardzo przystępny sposób nie tylko krótko opisuje otrzymane wyniki, ale również kontrastuje je z bardziej powszechnym rozumieniem obecnym w literaturze. Należy pochwalić Doktoranta za taki styl podsumowania, gdyż w jasny i klarowny sposób dowodzi słuszności tytułu swojej dysertacji.

Podsumowując, doktorant wykonał szereg cennych obliczeń jak i zaproponował nową metodę do studiowania funkcji spektralnych w modelu t - J oraz t - J^z . W mojej opinii, wyniki mgr. Piotra Wrzoska stanowią istotny wkład do teorii układów silnie skorelowanych elektronów. Przedłożona rozprawa spełnia wszystkie zwyczajowe oraz prawne wymagania określone w ustawie z dnia 20 lipca



Politechnika Wrocławska

Instytut Fizyki Teoretycznej

2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (tekst jednolity: Dz. U. z 2023 r. poz. 742 z późn. zm.) do nadania stopnia doktora w dyscyplinie nauki fizyczne. Na tej podstawie wnioskuję do Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Fizyczne o dopuszczenie magistra Piotra Wrzosa do publicznej obrony oraz dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Jacek Herbrych
dr hab. Jacek Herbrych



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wrocławska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434