

Prof. dr hab. Romuald Lemański
Instytut Niskich Temperatur
i Badań Strukturalnych PAN
we Wrocławiu

Wrocław, 10 lutego 2017 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej pani mgr Banhi Chatterjee

p. t. „Screening and Friedel oscillations in inhomogeneous systems with correlated electrons”

1. Informacje ogólne o tym czego dotyczy rozprawa i jaki jest jej zakres

W swojej rozprawie Autorka podjęła się bardzo ambitnego zadania zbadania niejednorodnego modelu Hubbarda, posługując się różnymi wariantami teorii dynamicznego pola średniego (DMFT od Dynamic Mean Field Theory). Jak wiadomo, model Hubbarda bardzo trudno się bada nawet w przypadku jednorodnym ze względu na obecne w nim korelacje elektronowe i efekty wielociałowe. Dlatego tylko w nielicznych przypadkach szczególnych udało się uzyskać zadawalając rezultaty, takich jak na przykład nieskończony układ jednowymiarowy (1D), nieskończony układ w granicy dużych wymiarów ($D \rightarrow \infty$), czy też małe układy skończone. Jednak uzyskanie tych rezultatów wiązało się z zastosowaniem bardzo zaawansowanych, skomplikowanych metod, takich jak *ansatz* Bethego w przypadku 1D, formalizm DMFT w przypadku $D \rightarrow \infty$, czy metoda kwantowego Monte Carlo w przypadku układów skończonych. Tymczasem pani mgr Banhi Chatterjee pod opieką jej promotora, prof. dr hab. Krzysztofa Byczuka, podjęła wyzwanie i przeprowadziła analizę niejednorodnego modelu Hubbarda, mając świadomość występujących tam trudności.

Podstawową wielkością obliczaną w tej rozprawie jest lokalna gęstość elektronowa wyznaczona dla każdego węzła sieci krystalicznej. Na podstawie przestrzennego rozkładu tej gęstości przeanalizowano zjawisko ekranowania oraz oscylacje Friedela (FO od Friedel oscillations) wokół jednej domieszki, w przypadku dwu lub więcej przypadkowo rozmieszczonych domieszek oraz w przypadku rozciągłej niejednorodności w postaci układu dwufazowego.

Obliczenia zostały przeprowadzone dla układów skończonych jedno-, dwu- i trój-wymiarowych metodą DMFT osobno dla każdego nierównoważnego węzła sieci krystalicznej. Zastosowana tutaj wersja metody DMFT została nazwana „Real space DMFT” (R-DMFT), która w tym przypadku sprowadza się do teorii niejednorodnego DMFT, co wydaje mi się bardziej adekwatną nazwą.

Jak wiadomo, sednem metody DMFT jest znalezienie samouzgodnionego rozwiązania układu nieliniowych równań na odpowiednie funkcje Greena i energie własne, które realizuje się w kolejnych krokach iteracji w tzw. pętli DMFT. W przypadku modelu Hubbarda najtrudniejszym

do pokonania ogniwem tej pętli jest rozwiązanie tzw. problemu SIAM (Single Impurity Anderson Model). Spośród wielu różnych znanych technik rozwiązywania SIAM, zwanych „*impurity solvers*”, Autorka rozprawy wykorzystała kilka z nich: Numerical Renormalization Group (NRG), Continous Time Quantum Monte Carlo (CT-QMC), oraz trzy metody fenomenologiczne, w których zakłada się ‘*a priori*’ postać funkcyjną energii własnej Σ . Pomimo tego, że wyniki otrzymane każdą z tych technik różnią się od siebie, to jednak w większości przypadków zgadzają się ze sobą jakościowo, a gdy tak jest, to w znacznej mierze również ilościowo.

2. Dane formalne na temat rozprawy (info o publikacjach, które stanowią jej podstawę, jakie są rozdziały, ilość stron, info o danych bibliograficznych, itd.)

Rozprawa pani mgr Banhi Chatterjee jest skonstruowana prawidłowo i napisana dość przejrzysto. Liczy ona blisko 150 stron i składa się z 11 rozdziałów uzupełnionych trzema dodatkami, bibliografią liczącą 132 pozycje literaturowe oraz informacjami dotyczącymi kariery naukowej i osiągnięć Autorki. Ułatwieniem w czytaniu są zamieszczone na początku listy używanych symboli i skrótów nazw oraz lista rysunków.

Praca jest spójna i napisana stylem pedagogicznym umożliwiającym zapoznanie się z zawartymi w niej dość trudnymi treściami również osobom nie specjalizującym się w jej tematyce.

Część materiału zawartego w tej rozprawie została opublikowana w pracy: B. Chatterjee and K. Byczuk, *Screening of a single impurity and Friedel oscillations in Fermi liquids*, Journal of Physics: Conference Series **592**, 012059 (2015). A obecnie przygotowywana jest do wysłania do druku kolejna, dość obszerna praca, zatytułowana *Friedel oscillations at Mott transition in electron systems*.

W rozdziale wstępnym jasno przedstawiono cel rozprawy i zasygnalizowano co jest treścią kolejnych rozdziałów. W rozdziale 2 wyjaśniono co to są oscylacje Friedela i krótko omówiono stan badań na ich temat od strony eksperymentalnej i teoretycznej. W rozdziale 3 omówiono układy silnie skorelowanych elektronów podając przy tym różne ich przykłady. W rozdziale 4 przedstawiono model Hubbarda z niejednorodnymi potencjałami, natomiast w rozdziale 5 omówiono dość szczegółowo formalizm DMFT w przestrzeni rzeczywistej. Rozdziały 1-5 będące w moim przekonaniu bardzo dobrym wprowadzeniem do zasadniczej części rozprawy zawierającej oryginalny wkład Autorki, liczą w sumie 43 strony.

Wyniki stanowiące oryginalny wkład Autorki zamieszczone są w rozdziałach 6-9, przy czym najbardziej obszernym jest liczący aż 48 stron rozdział 6, w którym przedstawione są rezultaty obliczeń w przypadku jednej domieszki. Omówiono tam szczegółowo 5 różnych metod otrzymywania wyników dla układów 1D, 2D i 3D z różnymi parametrami oddziaływania kulombowskiego pomiędzy elektronami i różnymi potencjałami domieszki. Oprócz oscylacji

gęstości elektronowej (FO) wyznaczono też ładunek ekranujący i funkcje spektralne, a następnie zweryfikowano tzw. regułę sum Friedela.

Z kolei w rozdz. 7 rozpatrywane są przypadki z dwoma lub pięcioma losowo rozmieszczonymi domieszkami w układach 1D i 2D, a w rozdziale 8 układy złożone z dwóch przylegających do siebie rozciąłych faz o różnych potencjałach jonowych. Natomiast rozdz. 9 jest poświęcony obliczeniom opartym o gęstość stanów typu półokręgu charakteryzującą sieć Bethego w granicy $D \rightarrow \infty$.

Rozdz. 10 zawiera zwięzłe podsumowanie wyników rozprawy, a w rozdz. 11 przedstawione są otwarte problemy, które Autorka uznaje jako możliwe dalsze kierunki badań.

W Dodatku A przedstawiony jest uproszczony schemat wyznaczania temperatury przejścia fazowego Motta w układach skończonych, a w Dodatku C podane są szczegóły techniczne obliczeń numerycznych metodami RDMFT oraz CTQMC.

Natomiast w Dodatku B podana jest procedura tworzenia macierzy Hamiltonianu dla układów o wymiarach wyższych niż 1D. Moim zdaniem nie jest to potrzebne, gdyż jest to standardowa procedura oczywista dla tych wszystkich, którzy konstruują macierze Hamiltonianu np. w układach 2D lub 3D i nie jest to sprowadzaniem układu o wyższych wymiarach do układu 1D, jak sugeruje podany tytuł Dodatku B. O wymiarowości decyduje bowiem nie sposób ponumerowania węzłów tylko ilość najbliższych sąsiadów każdego węzła, co szczególnie jest widoczne gdy w ramach metody DMFT rozpatrywane są układy w granicy dużych wymiarów.

Jednak moje wątpliwości budzi sam fakt przyporządkowania stanów układu poszczególnym węzłom sieci, gdyż jest to uzasadnione tylko dla opisów jednoelektronowych, wtedy gdy np. elektrony poruszają się na sieci i oddziałują z nią, ale nie oddziałują pomiędzy sobą. Natomiast w modelu Hubbarda elektrony oddziałują ze sobą i nie rozumiem jak można tutaj przyporządkować stanom układu poszczególne węzły sieci.

3. Ocena zawartości merytorycznej

Nie sposób (i zresztą nie jest to celowe) przytoczyć tutaj wszystkich, dość licznych wyników i wniosków otrzymanych w rozprawie, dlatego podam i ustosunkuję się tylko do kilku z nich, które są wg mnie najważniejsze i najbardziej charakterystyczne dla tej rozprawy.

Chyba najbardziej kontrowersyjnym rezultatem tej rozprawy (czego zresztą Autorka jest świadoma) jest to, że na podstawie zachowania się oscylacji Friedla otrzymuje się występowanie przejścia fazowego Motta nawet w układzie 1D, podczas gdy ścisłe rozwiązanie Lieb'a i Wu (Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968)) wyklucza istnienie tego przejścia w tym przypadku. Tak więc w układzie 1D obliczenia metodą DMFT ukazują zjawisko, którego tam nie ma. Autorka rozprawy nazywa ten przypadek „toy model”, ale wg mnie trzeba tutaj raczej mówić o skrajnej

nieadekwatności tej metody do badania układów jednowymiarowych. Co oczywiście nie oznacza, że w takich układach nie ma oscylacji Friedela. Na przykład ściśle rozwiązanie układu nieoddziałujących elektronów w 1D pokazuje, że one tam rzeczywiście istnieją. Dlatego moim zdaniem celowe jest zbadanie FO nie tylko metodą DMFT, ale również innymi metodami, takimi jak ścisła diagonalizacja lub metoda Monte Carlo.

Osobną sprawą jest fakt, że wykorzystywana przez Autorkę metoda obliczania funkcji spektralnych i innych charakterystyk układu opiera się na sumowaniu odpowiednich funkcji po częstościach Matsubary, które to sumowanie staje się coraz wolniej zbieżne w miarę zbliżania się do temperatury $T=0$. Dlatego uzyskane rezultaty są wiarygodne jedynie wtedy, gdy temperatura nie jest zbyt niska i w związku z tym nie można na podstawie wyników otrzymanych tą metodą wyciągać wniosków co do istnienia lub nieistnienia przejścia Motta w $T=0$. Nie jest też oczywiste czy poprawne jest porównywanie wyników numerycznych uzyskanych dla układów skończonych z wynikami Lieba i Wu otrzymanymi dla układu nieskończonego.

Warto więc podkreślić, że niezależnie od tego, że metoda DMFT, ze względu na założenie lokalności energii własnej (t.j. brak korelacji przestrzennej) pracuje tym lepiej im większy jest wymiar układu i może prowadzić do wątpliwych rezultatów w układach niskowymiarowych (zwłaszcza w 1D), to i tak trudno jest porównywać układy badany przez Lieba i Wu (jednorodny układ nieskończony w 1D i dla $T=0$) z badanymi w tej rozprawie układami skończonymi z domieszkami w $T>0$.

Główną wątpliwością, która powstaje przy ocenie tej rozprawy jest fakt, że spośród dość obszernego materiału w niej zawartego, jak dotąd tylko niewielka jego część została opublikowana, i to tylko w jednej pracy. Chociaż wg zapewnień Autorka kolejne prace są przygotowywane do wysłania do druku i mam nadzieję, że zostaną zaakceptowane do publikacji. Albowiem w dysertacji znajduje się wystarczająco dużo nowych, oryginalnych i interesujących wyników, które moim zdaniem po odpowiednim zredagowaniu zasługują na opublikowanie. Jednak aby to było możliwe sugeruję unikania podawania i forsowania w nich jawnie kontrowersyjnych stwierdzeń dotyczących np. przejścia Motta w układzie 1D.

4. Uwagi dotyczące formy przedstawienia wyników

Recenzowana praca jest na ogół napisana poprawnie i dobrze się ją czyta, to jednak zdarzają się w niej też pewne uchybienia i braki dbałości o dopracowanie niektórych szczegółów redakcyjnych. Przykładem takiego uchybienia utrudniającego percepcję jest dość często występujące przesunięcie rysunków względem omawiającego je tekstu, tzn. zamieszczone na danej stronie tekst i rysunki nie odpowiadają sobie: tekst dotyczy rysunków zamieszczonych kilka stron dalej, a rysunki są omawiane kilka stron wcześniej.

Spośród drobnych, ale rzucających się w oczy błędów jest podanie niewłaściwej liczby lat (40 zamiast 65), które upłynęły od roku 1952, kiedy to J. Friedel przewidział teoretycznie istnienie oscylacji gęstości elektronowej nazwanych później od jego nazwiska oscylacjami Friedela. Przypuszczalnie Autorka korzystała z tekstu napisanego ok. 25 lat temu i automatycznie przepisała zawarty w nim fragment do swojej dysertacji.

Błędem jest też w rozdziale 3 uznanie pierwiastka plutonu (Plutonium) jako 4f-elektronowego metalu ziem rzadkich, podczas gdy jest to 5-f elektronowy aktynowiec.

Inne zauważone drobne pomyłki wymienione są poniżej.

- Pisząc o związkach ciężkoferminowych Autorka podaje, że ich masa efektywna jest tysiące razy większa od masy swobodnego elektronu, podczas gdy do tej grupy materiałów zalicza się także związki o masie efektywnej większej „zaledwie” setki lub nawet tylko dziesiątki razy większej od masy elektronu swobodnego.
- We wzorach (4.3), (4.7) i (4.8) brakuje indeksów spinowych. We wzorze (4.14) zamiast $U_{\{const.\}}(r)$ powinno być $U_{\{per\}}(r)$, a poniżej tego wzoru w definicji $t_{\{ij\}}$ nie powinno być $t(|R_i - R_j|)$ tylko $t(|R_i - R_j|)$.
- We wzorach (5.14) i (5.19) indeks przy funkcji G powinien być $G_{\{ii\sigma\}}$, a nie $G_{\{ij\sigma\}}$.
- Podając odnośniki literaturowe Autorka nie zadbała o ich rosnącą kolejność (np. w paragrafie 5.4).
- Tuż przed wzorem (5.97) Autorka powołuje się na równanie (6.26), którego w ogóle nie ma w rozprawie.
- Nie jest jasne co oznacza G^+ we wzorze (5.140).
- W drugim akapicie na str. 47 brakuje początku zdania („is computationally extremely ...”).
- Na rys. 6.3 różne kolory zlewają się i dlatego nie widać tam różnicy gdy zmienia się parametr g .
- W podpisie pod rys. 6.7 podano, że domieszka znajduje się na węźle nr 20, podczas gdy z samego rysunku wynika, że na węźle nr 25.
- Na wielu rysunkach są zbyt małe rozmiary czcionki. Na przykład na rys. 6.21 i 6.22.
- Brak jest w tekście odniesienia do rys. 6.24.
- W bibliografii brak jest w wielu miejscach pełnych danych. Na przykład w pozycji [33] podano tylko Anderson P 50. Podobnie jest w pozycjach [6/], [10/], [111] i [121].

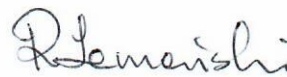
Czytając tę rozprawę natknąłem się też na kilka drobnych niejasności.

- Dlaczego na rys. 6.1 są po dwie strzałki w kierunku pionowym, a tylko po jednej w kierunku poziomym?
- Na jakiej podstawie wybrano parametry a i b we wzorze. (6.8)?
- Jak pogodzić w podpisie pod rys. 6.7 to, że układ jest „half-filling” i jednocześnie wartość średnia $n=0.9$?

5. Podsumowanie

Podsumowując chcę wyrazić swoje uznanie dla pani mgr Banhi Chatterjee za podjęcie wielotorowych (tzn. kilkoma różnymi metodami i dla różnych układów w 1D, 2D i 3D) badań nad zjawiskiem ekranowania i oscylacji Friedela w niejednorodnym modelu Hubbarda, który jest bardzo nietrywialnym modelem silnie skorelowanych elektronów. Obliczenia te wymagały bardzo dobrego opanowania skomplikowanego formalizmu DMFT i metod numerycznych, a także odpowiedniej znajomości problemów fizycznych występujących w badanych układach. Pomimo tego, że jak dotąd została opublikowana tylko jedna praca obejmująca jedynie część wyników otrzymanych przez Autorkę i zaprezentowanych w rozprawie i pomimo zauważonych niedociągnięć redakcyjnych uważam, że zawarty w niej materiał jest na tyle istotny, obszerny i nowatorski, że zasługuje na uzyskanie przez panią Banhi Chatterjee stopnia naukowego doktora nauk fizycznych. To moje przeświadczenie wynika m.in. z przekonania, że znaczna część niepublikowanych dotąd wyników wchodzących w skład dysertacji nadaje się (po odpowiednim ich zredagowaniu) do opublikowania. I mam nadzieję, że tak też się stanie.

Tak więc w mojej opinii recenzowana rozprawa doktorska spełnia kryteria wymagane w Ustawie o tytule i stopniach naukowych i dlatego wnoszę o dopuszczenie pani mgr Banhi Chatterjee do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Romuald Lemański