



Instytut Fizyki Molekularnej PAN

ul. M. Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań

Prof. dr hab. Bogdan Bułka

E-mail: bulka@ifmpan.poznan.pl; tel. 61 8695-152

Dziękuję Wydziału Fizyki UW
Sekcja ds. pracowniczych
Wpłynęło dn. 29.12.2017
podpis

Recenzja rozprawy doktorskiej mgra Jana Skolimowskiego pt. “Theoretical investigation of correlated fermions on optical lattice with spin-dependent disorder”

Przedłożona rozprawa doktorska Pana mgra Jana Skolimowskiego została przygotowana pod kierownictwem prof. dr hab. Krzysztofa Byczuka w Instytucie Fizyki Teoretycznej Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Rozprawa liczy łącznie 81 stron i została zredagowana po angielsku, w sposób przejrzysty, bezbłędny (poza kilkoma drobnymi literówkami), czyta się ją z dużą przyjemnością. We wstępie autor przedstawił jasno motywację podjęcia tego tematu, a która wiąże się z chęcią poznania procesu lokalizacji elektronów (lub ogólniej fermionów) w układach z nieporządkiem, przy uwzględnieniu oddziaływań kulombowskich między elektronami. Zagadnienie to należy do fundamentalnych w fizyce materii skondensowanej, w poznaniu natury transportu elektronowego, a także zrozumienia korelacji elektronowych, tworzenia się stanów wieloelektronowych i ich roli dla magnetyzmu materii.

Studia teoretyczne mgra J. Skolimowskiego nawiązują do eksperymentów na sieciach optycznych ultra zimnych atomów, dziedziny fizyki, która ostatnio wzbudza ogromne zainteresowanie i przeżywa ogromny rozwój. Dlatego rozprawę rozpoczyna krótki opis eksperymentów na ultrazimnych atomach. Pokazano, że do sieci można „wprowadzić” nieporządek potencjałów; oświetlając sieć optyczną zimnych atomów światłem laserowym przechodzącym poprzez szkło dyfuzyjne, albo poprzez dodatkową warstwę zimnych atomów o niewspółmierniej strukturze. Ponadto jeśli użyje się pola magnetycznego ustawionego pod pewnym kątem do polaryzacji światła laserowego tworzącego sieć optyczną, to w rezultacie otrzyma się potencjał, który posiada dodatkową spinowo-zależną składową zmieniającą się przestrzennie. Badania teoretyczne

Skolimowskiego dotyczą właśnie takich sieci optycznych fermionowskich zimnych atomów, gdzie występuje lokalny spinowy nieporządek potencjału.

Teoretyczna analiza sieci optycznych zimnych atomów opiera się na hamiltonianie Hubbarda, pierwotnie służącym do opisu oddziałujących elektronów. Rozdział 3 rozprawy zgrabnie opisuje podstawowe cechy tego modelu. Mimo swej prostoty, poprawne wyznaczenie stanu podstawowego tego modelu i zbadanie jego własności nie jest łatwe. Mgr J. Skolimowski korzysta z dynamicznej teorii pola średniego (*ang. Dynamical Mean-Theory, akronim: DMFT*), której użycie bardzo dobrze uzasadnił, pokazał przy tym, że inne podejścia są mu także znane. W tej procedurze ważnym elementem jest rzutowanie na model jednej domieszki Andersona (SIAM) i jego rozwiązaniu przy użyciu numerycznej grupy renormalizacji (NRG). Procedury te są wystarczające do badań układów periodycznych, w tym przejścia metal-izolator typu Motta, jednak wprowadzenie nieporządku do modelu wymaga specjalnych technik. W teoretycznych badaniach stopów metali wykorzystuje się przybliżenie koherentnego potencjału (CPA), metodę którą udało się zintegrować z procedurą DMFT. Dla badania lokalizacji Andersona konieczny jest jednak kolejny krok. W rozprawie wykorzystano teorię typowej średniej (*ang. typical medium theory - TMT*) zaproponowaną ostatnio przez Dobrosavljević'a i współpracowników, ref. [98]. Teoria ta opiera się na obserwacji, że stanom zlokalizowanym odpowiada spektrum dyskretne, zaś stany rozciągle mają spektrum ciągłe. Dlatego oblicza się geometryczną średnią lokalnej gęstości stanów, która jest bezpośrednio związana z najbardziej prawdopodobną (typową) wartością lokalnej amplitudy funkcji falowej.

Omówiona jest także sieć Bethe'go, która ma strukturę samopowtarzalną i dlatego łatwo ją wykorzystać do samozgodnych obliczeń w ramach DMFT. Szkoda, że autor nie omówił problemu lokalizacji na tej sieci, oraz jak otrzymane przez niego rezultaty mają się do obliczeń prowadzonych na sieci kwadratowej lub kubicznej.

Rozdział 3 pokazał, że doktorant jest dobrze przygotowany do studiów roli nieporządku, świetnie orientuje się w stosowanych metodach badawczych. Za cel rozprawy doktorskiej mgr. J. Skolimowski przyjął zbadanie sieci oddziałujących fermionów w obecności spinowo-zależnego nieporządku w ramach modelu Andersona-Hubbarda, w szczególności zbadanie przejścia metal-izolator. Przyjęto, że nieporządek potencjału jest tylko dla jednej orientacji spinów, co daje możliwość nowego oryginalnego

podejścia do określenia natury przejścia metal-izolator. Ważną motywacją teoretycznych studiów jest bezpośrednio nawiązanie do eksperymentów na sieciach optycznych.

W pierwszej kolejności analizowany jest przypadek paramagnetyczny, dla średnio jednego fermionu na węzeł sieci. Obliczenia wykonano na sieci Bethe'go, i w temperaturze $T = 0$. Najważniejszym rezultatem badań jest diagram fazowy względem amplitudy potencjału nieporządku Δ i lokalnego kulombowskiego oddziaływania U , prezentowany na rys. 4.1. Pokazano, że poza znanymi przejściami metal-izolator typu Motta-Hubbarda (względem U i dla $\Delta \rightarrow 0$) i lokalizacją Andersona (względem Δ , dla $U \rightarrow 0$), występuje nowa faza związana z przejściem typu Falicova-Kimballa, kiedy to tylko jeden typ fermionów (np. o spinie $\uparrow$) jest zlokalizowany, podczas gdy drugi typ fermionów (o spinie $\downarrow$) jest nadal przewodzący, o rozciągłej funkcji falowej. Nowa faza, została nazwana przez mgra J. Skolimowskiego: „spin-selective Anderson localized phase”, co można przetłumaczyć spinowo-selektywna zlokalizowana faza Andersona, i która pojawia się przy wyższym nieporządku, ale niewielkim oddziaływaniu kulombowskim. Dla większego oddziaływania kulombowskiego nieporządek jest „przenoszony” do drugiego podukładu fermionów i następuje lokalizacja obu typów fermionów.

Krokiem następnym było zbadanie magnetycznych uporządkowań. Obliczenia prowadzono na sieci Bethe'go, zakładając dwie podsieci, dlatego możliwe uporządkowania magnetyczne to: antyferromagnetyczne i ferromagnetyczne. Ponieważ dodatkowo długość momentu magnetycznego w obu podsieciach może być różna to spodziewane jest uporządkowanie ferrimagnetyczne i z modulowaną fazę ferromagnetyczną. Z opisanego wcześniej przypadku paramagnetycznego wiemy, że należy również uwzględnić parametr porządku związany z lokalizacją Andersona, który jest wyrażany geometryczną lokalnej gęstości stanów na poziomie Fermiego dla określonego kierunku spinu. Rezultaty obliczeń prezentuje diagram fazowy względem amplitudy potencjału nieporządku Δ i lokalnego kulombowskiego oddziaływania U , rys. 4.13. Porównując z diagramem na rys.4.1 dla przypadku paramagnetycznego, widać istotne różnice. Bez nieporządku, $\Delta = 0$, stanem podstawowym jest antyferromagnetyk Néela, z przerwą energetyczną, widoczną w gęstości stanów. Nieporządek powoduje modyfikację parametru magnetycznego, pojawia się faza ferrimagnetyczna. Jak można było się spodziewać wraz z nieporządkiem ulega rozmyciu przerwa energetyczna, i ten proces może być odmienny dla fermionów o różnym kierunku spinu. Obliczenia Skolimowskiego pokazują, że w małym zakresie parametrów i dla niewielkich U nastąpi zamknięcie przerwy energetycznej tylko dla fermionów o spinie w

górze, kiedy nadal będzie mała przerwa dla fermionów o spinie w dół. Dalsze zwiększenie nieporządku zamknie obie przerwy, układ będzie metaliczny, ale jednocześnie następuje zmiana uporządkowania magnetycznego na ferromagnetyczne. W tej fazie porządek magnetyczny ma charakter lokalny, generowany przez spinowo-zależny nieporządek potencjału.

Tutaj pragnę zapytać: Jak spinowo-zależny nieporządek zmienia długość lokalizacji, które zapewne jest różna dla fermionów o różnych spinach, i jak to wpływa na zmianę sprzężenia wymiennego?

Powróćmy do diagramu fazowego, rys.4.13. Poprzednia analiza sugeruje pojawienie się spinowo-selektywnej fazy z lokalizacją Andersona dla jednego kierunku spinu w obszarze z bardzo dużym nieporządkiem, ale pozostając nadal w reżimie niedużego parametru U . Dobrze to pokazuje wykres typowej lokalnej gęstości stanów na rys. 4.18 dla nieporządku $\Delta = 1$. Na tym rysunku widać także, że dla większego oddziaływania $U = 0.5$ następuje zanik lokalnej gęstości stanów dla obu typów fermionów, i przejście do fazy izolatora. Jest to kolejny oryginalny, ciekawy wynik Skolimowskiego, wskazujący na istnienie modulowanego uporządkowania ferromagnetycznego (SDW) dla silnego spinowo-zależnego nieporządku i dla dużego oddziaływania kulombowskiego w modelu Andersona-Hubbarda.

Podsumowując, rozprawa doktorska mgra Jana Skolimowskiego stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, zawiera ciekawe wyniki, które są ważnym wkładem w poznanie procesu lokalizacji oddziałujących fermionów na sieci optycznej. Stwierdzam, że spełnia ona wszystkie ustawowe i zwyczajowe wymagania; wnioskuję o dopuszczenie Pana magistra Jana Skolimowskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

B. Bułka

Poznań, 27 grudnia 2017 r.

Prof. dr hab. Bogdan Bułka