

2017 -12- 05

Kraków, 28 listopada 2017



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Jana Skolimowskiego zatytułowanej:
Theoretical investigation of correlated fermions on optical lattice
with spin-dependent disorder,
złożonej na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego

Instytut Fizyki

im.

Mariana Smoluchowskiego

Rozprawa doktorska Pana mgr. Jana Skolimowskiego została wykonana pod kierunkiem prof. dr hab. Krzysztofa Byczuka z Instytutu Fizyki Teoretycznej na Wydziale Fizyki UW. Dotyczy własności skorelowanych fermionów (ultrazimnych atomów) na sieci optycznej, w której ma miejsce spinowo-zależny nieporządek atomowy, modelowany przez zależny od kierunku spinu potencjał przypadkowy jednocząstkowy. Taki układ jest modelowany przy pomocy hamiltonianu Andersona-Hubbarda, a skorelowane cząstki poruszają się na sieci Bethego. Model ten jest rozwiązywany w ramach teorii dynamicznego pola średniego (DMFT), z dodatkowym uśrednieniem potencjału przypadkowego po możliwych jego realizacjach przestrzennych. Charakterystyczną cechą fizyczną tego podejścia jest potraktowanie na równi korelacji jednocząstkowych i potencjału przypadkowego. Taki sposób podejścia pozwala na rozważenie m.in. zarówno lokalizacji typu Andersona zaindukowanej przypadkowym nieporządkiem atomowym, jak i lokalizacji Motta-Hubbarda zaindukowanej silnym oddziaływaniem odpychającym pomiędzy cząstkami. Dodatkowo, zapostulowanie zależnych od położenia zależnego od spinu nieporządku strukturalnego prowadzi w naturalny sposób do nietrywialnych własności magnetycznych, które konkurują z tymi wynikającymi z korelacji atomowych. W efekcie, wyniki rozważań teoretycznych zależą od trzech parametrów: stosunku wielkości oddziaływań lokalnych U do tzw. gołej szerokości pasma cząstek W , wielkości rozrzutu amplitudy potencjału atomowego Δ do W oraz od koncentracji cząstek (tzw. stopnia wypełniania pasma) n .

Zakład Teorii Materii

Skondensowanej i Nanofizyki

Prof. dr hab. Józef Spałek

e-mail: jozef.spalek@uj.edu.pl

tel. (sekr): 12 664-45-62

W rozprawie rozpatrywano szczegółowo dwie sytuacje: (i) przypadek paramagnetyczny, kiedy pojawienie się magnetycznego uporządkowania dalekozasięgowego jest zablokowane przez nieporządek poza szczególnymi sytuacjami, oraz (ii) przypadek z porządkiem naprzemiennym, w idealnym przypadku jest to długozasięgowy przypadek antyferromagnetyczny lub ferrimagnetyczny.

adres IF UJ:

ul. St. Łojasiewicza 11

PL 30-348 Kraków

tel. +48(12) 664-47-03

fax +48(12) 664-49-06

e-mail: fizyka@uj.edu.pl

Po dwóch dość przystępnych rozdziałach zawierających informacje wstępne zarówno o skorelowanych układach fermionowych z nieporządkiem (por. rozdz. 1), jak i wprowadzeniem do układów zimnych atomów na sieciach optycznych, w rozdz. 3. doktorant przedstawia zasadnicze cechy modelu teoretycznego oraz charakteryzuje wybrane metody jego rozwiązania. Autor najpierw opisuje pokrótce wyniki dla przybliżenia Hartree-Focka dla $U/W \ll 1$ i wprowadza pojęcie przerwy Slatera. Tutaj byłoby dobrze, gdyby omówić pokrótce, czym różnią się od nich wyniki dla przypadku izolatora Motta-Hubbarda przez podsumowanie np. rozwiązania typu Hubbard III, dla którego pojawiają się tzw. podpasma Hubbarda. Chciałbym w tym miejscu wymienić zapomnianą, niestety moim zdaniem, dawną pracę, w której otrzymano analityczne rozwiązanie typu Hubbard III dla lorentzowskiej gęstości stanów, które zresztą redukuje się do rozwiązania w przybliżeniu CPA (por. M Acquarone et al., J. Phys. C: Sol. State Phys. **15**, 959-68 (1982)). Takie podpasma pojawiają się zresztą później w rozprawie, gdzie zostały otrzymane metodą DMFT. Autor cytuje tam jednak tylko wyniki dotyczące kinetycznej wymiany w granicy $U/W \gg 1$. Uwaga moja jest istotna ze względu na fakt, że najciekawsze wyniki fizyczne są omawiane dla przypadku $U \sim W \sim \Delta$, a w tym przypadku granice Hartree-Focka i silnych korelacji są obszarami, jakkolwiek istotnymi z punktu widzenia testowania stosowanych metod, to jednak asymptotycznymi. Następnie autor charakteryzuje metodę DMFT i formułuje równanie Dysona w przybliżeniu lokalności energii własnej (self-energy). Trochę, jako osobie niezaangażowanej w stosowaniu tej metody, przydałoby się tutaj dokładniejsze omówienie mapowania problemu wyjściowego na model domieszki Andersona; odniesienie tylko do artykułu przeglądowego A. Georges'a et al., (Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996)) wydaje się niewystarczające, ponieważ autor tę metodę następnie stosuje do swoich celów. W drugiej części tego rozdziału autor omawia pokrótce szereg metod, głównie numerycznych, które stosuje w rozdz. IV do dyskusji rozwiązań interesujących go modeli. W końcowej części rozdziału trzeciego autor wprowadza sieć Bethego, w której każdy węzeł posiada z sąsiadów, a w szczególności wprowadza drzewo Cayley'a, dla którego rozważa układ równań typu DMFT w zamkniętej postaci dla modelu Isinga z niezerowym polem dla klastra złożonego ze spinu centralnego i z sąsiadujących spinów. Także, dyskutuje pokrótce taki klaster fermionów w przybliżeniu ciasnego wiązania oraz model rozciągnięty Falicova-Kimballa (nota bene, chyba brakuje spinowej liczby kwantowej σ w drugim wyrazie (3.50)). Rozumiem, że te wyniki stanowią wprawki przed właściwą dyskusją rozszerzonego modelu Hubbarda.

Mam tutaj jedno pytanie podstawowe. Rozumiem, że samouzgodnione równania na funkcje Greena w metodzie DMFT stosują się ściśle $d \rightarrow \infty$. Czy ma zatem sens rozpatrywanie tych rozwiązań dla sieci Bethego, nawet przy $z \rightarrow \infty$, skoro zawiera ona w swej definicji bardzo silny aspekt jednowymiarowy? A mianowicie jej

zaletą jest to, że nie trzeba uwzględniać ścieżek samopowrotnych (self-retracing paths). Ale ta cecha pozbawia te sieci prawdziwej wielowymiarowości (hiperkubiczności). Jak można ten argument obalić? Rozumiem, że doktorant rozjaśni mi tę dość niekonkretną, intuicyjną niepewność.

Przechodzę do omówienia rozdziału 4., który stanowi zasadniczy trzon tej rozprawy, w której autor startuje z modelu Hubbarda z nieporządkiem atomowym i rozwiązuje go przy pomocy metody DMFT używając metody numerycznej „NRG Ljubljana code”. Rozkład energii poziomego atomowego jest jednorodny (opisany przez funkcję Heaviside’a). Jest to zatem wersja rozwiązania zaproponowana od strony analitycznej przez V. Dobrosavljević’a i współpr. (por. Europhys. Lett **62**, 76 (2003)). Startuje ona z wybrania początkowej zespolonej funkcji hybrydyzacji i rozwiązania dla tej postaci tej funkcji modelu pojedynczej domieszki Andersona (SIAM). Przy rozwiązaniu autor rozważa szczegółowo dwa przypadki.

W pierwszym z nich autor rozważa przypadek paramagnetyczny, tj. dyskutuje wyniki w przypadku dwóch równoważnych podsieci i szczególną uwagę poświęca fluktuacjom ładunkowym uwypuklający konkurencję między wpływem nieporządku z tym pochodzącym od oddziaływań. Z rozwiązania modelu SIAM autor określa uśrednioną lokalną gęstość stanów, a także końcową postać funkcji hybrydyzacji co domyka całość problemu. Rozumiem, że autor rozważa jedynie przypadek jednej cząstki na oczko sieci. W takim przypadku w periodycznej sieci z symetryczną gęstością stanów względem wyjściowego punktu położenia poziomego atomowego mamy do czynienia z symetrią cząstka-dziura i potencjał chemiczny jest stały. Jednakże, tutaj autor rozważa układ nieuporządkowany i położenie tego poziomego zależy od kierunku spinu. Co prawda rozkład statystyczny tego poziomego (4.1) jest symetryczny względem zera energii, ale niesymetryczny względem $\sigma = \pm 1/2$. Czy zatem dalej możemy uważać wartość potencjału chemicznego za stałą? Zapewne tak dla porządku czysto paramagnetycznego, ale czy wtedy można takie rozwiązanie wymusić jak rozkład (4.1) jest jawnie zależny spinowo? Także, co oznacza wtedy określenie „rozwiązanie paramagnetyczne”? Także, jak różnią się rozwiązania dla różnej wartości z ? Czy da się określić górną wartość z , od której wyniki praktycznie nie zależą od jej wartości?

Rys 4.1 przedstawia diagram fazowy na płaszczyźnie $U - \Delta$. Szczególnie interesujące jest tutaj pojawienie się fazy „selektywnie spinowo zlokalizowanej”, co jednak wydaje mi się wytłumaczalne, gdyż rozkład (4.1) jest niesymetryczny ze względu na kierunek spinu. Czy o to chodzi? Drugie pytanie wynika z porównania tego diagramu z tym otrzymanym wcześniej przez K. Byczuka i współpr. (2005) i przedstawionym na rys. 4.2. Czy ten na rys. 4.1 redukuje się do tego na rys. 4.2, gdy nieporządek nie zależy od spinu? Taka uwaga byłaby ze wszech miar pożądana. Po trzecie, w jakich jednostkach wyrażone są Δ oraz U ? W jednostkach $|t|$ czy W ? Po czwarte, autor pisze, że „spin-dependent disorder reduces the metallicity”, podczas gdy, porównując rys. 4.1 oraz 4.2 faza metaliczna jest określona w obu przypadkach do około $\Delta \sim 1.5$ oraz $U = 1$. Na czym zatem polega ta różnica? W końcu, mam problem z dyskusją „coexistence regime”. Czy tak zwany „pik centralny” (między podpasмами Hubbarda) tu też występuje? Jakie jest jego

znaczenie? Pytam o to, gdyż mam wątpliwości co do rozwiązania DMFT w ogólnym przypadku. Czy nie jest on artefaktem metody DMFT? Jaki jest pogląd autora na ten temat? Chętnie się tutaj douczę czegoś nowego.

Omówię teraz wpływ uporządkowania magnetycznego na wyniki modelu (podrozdział 4.2). Autor rozważa cztery rodzaje takiego uporządkowania wyszczególnione dla przypadku jednowymiarowego na rys. 4.12 a-d. Odpowiedni dla tego porządku diagram fazowy przedstawiono na rysunku 4.13. Wyniki są dla mnie zrozumiałe i w dobrej zgodności z tymi przedstawionymi na rys. 4.1 poza fazą SSLP-I. Tutaj pojawia się jeszcze jedno pytanie: jakiego rzędu są to przejścia? Innymi słowy, jakiego rodzaju przejścia fazowe wyznaczają linie graniczne między nimi? Czy występowanie fazy SSLP-I jest związane z przejściem nieciągłym? Występowanie faz ferrimagnetycznych (typu b) oraz c)) natomiast wydaje się być zrozumiałe ze względu na dwu-podsieciowy charakter problemu i nierównoważność spinową nieporządku atomowego.

Podsumowując, rozprawa zawiera solidną analizę numeryczną modelu Hubbarda ze spinowo-zależnym przypadkowym potencjałem atomowym. Zawiera nowe wyniki dotyczące diagramu fazowego w tym przypadku będące uogólnieniem wyników otrzymanych wcześniej przez innych autorów, a także dodatkowo szczegółową analizę własności nowych stanów magnetycznych pojawiających się w tym przypadku. Wyniki rozprawy zostały częściowo opublikowane w dwóch obszernych publikacjach oryginalnych (NJP **15**, 045031 (2013); Phys. Rev. B **92**, 094202 (2015)).

W związku z moją pozytywną oceną rozprawy doktorskiej mgr. Jana Skolimowskiego stwierdzam, że spełnia ona kryteria odpowiedniej ustawy o stopniach i tytule naukowym i wnioskuję o wszczęcie dalszych etapów, aż do jej publicznej obrony włącznie.



Józef Spałek

profesor zwyczajny nauk fizycznych