

Prof. dr hab. Jacek Dziarmaga
Instytut Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Jagiellońskiego
ul. Prof. Stanisława Łojasiewicza 11
30-348 Kraków
e-mail: dziarmaga@th.if.uj.edu.pl

Kraków, 10 listopada 2020

**Ocena rozprawy doktorskiej pani magister Doroty Gotfryd pt.
*Niskoenergetyczne modele dla izolatorów Motta ze skończonym sprzężeniem
spin-orbita.***

Przedstawiona rozprawa została parta na dwu publikacjach w Physical Review B oraz po jednej w Physical Review Research i Condensed Matter. W trzech z nich doktorantka jest pierwszym autorem a w jednej drugim co, biorąc pod uwagę szczegółowe deklaracje, adekwatnie oddaje jej wkład w powstanie tych prac. Musze wyznać, że w pierwszej chwili byłem przerażony objętością rozprawy liczącej 172 strony, ale ostatecznie z przyjemnością przeczytałem ją od deski do deski. Rozprawa składa się dwu części. Każda z nich jest poprzedzona obszernym wstępem podsumowującym dorobek innych badaczy, który zarazem wyjaśnia motywację dla podjętych badań. Co rzadkie, bardzo drobiazgowo rozróżniony został bardzo istotny osobisty wkład doktorantki od wkładu jej współpracowników. Część pierwsza dotyczy realistycznych modeli opisujących tak zwane materiały Kitaeva, gdzie efektywne pseudospinowe stopnie swobody są wynikiem splątania spinów i orbitali, zaś część druga to prosty model dający intuicyjny wgląd w fizykę splątania spinowo-orbitalnego. Materiały Kitaeva są gorącym obszarem badań, ze względu na indukowany w nich przez pole magnetyczne nieabelowy chiralny porządek topologiczny, który może mieć fundamentalne znaczenie dla przyszłości informatyki kwantowej.

Materiały Kitaeva opisywane są dość złożonym hamiltonianem na sieci heksagonalnej o czterech rodzajach sprzężeń pomiędzy najbliższymi sąsiadami, stąd nazwa modelu: J-K- Γ - Γ' . Równie ważne jest sprzężenie J₃, pomiędzy trzecimi sąsiadami, które w rozprawie nie zostało wyczerpująco zbadane, chociaż przedyskutowano jakościowo jego wpływ na stabilizację fazy zygzakowatej. Obliczenia ab initio dają niezbyt spójne przewidywania stałych sprzężenia, chociaż w pewnym zakresie udało się uzyskać konsensus. Tematem rozprawy jest diagram fazowy modelu J-K- Γ - Γ' . Aby go przeskanować w systematyczny a jednocześnie klarowny sposób wprowadzono pomysłową parametryzację przestrzeni parametrów. Niezwykle użyteczne są ukryte symetrie w przestrzeni parametrów, które powodują, że obszary kwantowej

cieczy spinowej Kitaeva występują nie tylko w otoczeniu czystego modelu Kitaeva, ale także w innych mniej oczywistych obszarach parametrów. Wkładem doktorantki są przede wszystkim samouzgodnione obliczenia średniopolewe na 24-oczkowych klastrach. Tam gdzie to możliwe są one systematycznie konfrontowane ze ścisłą diagonalizacją. Mogło by się wydawać, że nie ma nic prostszego niż takie średnie pole, ale w rzeczywistości jest to bardzo mylne wrażenie. Liczba średnich które trzeba uwzględnić powoduje, że procedura samouzgadniania jest bardzo niestabilna. Tę trudność udało się pokonać dzięki uśrednieniu względem symetrii problemu, a także dzięki metodzie zlinearyzowanej, która pozwala z grubsza wskazać początkowe średnie.

Osobiście najbardziej mnie zainteresowała podklasa modelu J-K- $\backslash$ Gamma- $\backslash$ Gamma', gdzie oddziaływania dwuoczkowe można zdiagonalizować uzyskując uogólniony model Kitaeva o nieortogonalnych osiach oddziaływań. Zostało to obrazowo opisane jako model parasola. Po trudach wszechstronnej analizy całej gamy faz pełnego modelu jest to bardzo czysty akord na zakończenie części pierwszej. Zainspirował mnie on do uruchomienia skanu stanu podstawowego od modelu Kitaeva w kierunku heksagonalnego modelu kompasów --- którego stan podstawowy pozostaje kontrowersyjny --- przy pomocy sieci tensorowej iPEPS.

Część druga rozprawy to rozważania na temat splątania spinowo-orbitalnego na przykładzie prostego jednowymiarowego modelu, który zawiera zarówno człon Kugela-Khomskiego jak i lokalne sprzężenie spin-orbita uproszczone do postaci Isinga. Przyznam się, że zawsze gdy słyszę o splątaniu spinowo-orbitalnym, to w duchu się dziwię dlaczego sam fakt występowania tego splątania jest taki zaskakujący skoro spiny i orbitale oddziałują. Jednak, jak dowiaduję się z tej rozprawy, ma to uzasadnienie co najmniej historyczne. Rezultat typowych oddziaływań można zwykle ująć w ramach reguł Goodenough-Nishimori, które są konsystentne ze średniopolewym rozsprzężeniem spinów i orbitali. Dlatego uwaga badaczy skupia się na tych egzotycznych sytuacjach, gdy te reguły nie są wystarczająco dobre. Model badany w drugiej części rozprawy jest klinicznym przykładem, który pokazuje jak wyspy splątania wynurzają się z morza stanów średniopolewych. Jako miary splątania użyto entropii von Neumanna, która sumarycznie ujmuje wszystkie korelacje, jak i specyficznych funkcji korelacji. Zaletą tego prostego modelu jest możliwość wyjaśnienia złożonych efektów przy pomocy elementarnych narzędzi takich jak rachunek zaburzeń z degeneracją.

Pracę przeczytałem z przyjemnością. Lektura nasunęła mi szereg pytań i komentarzy. Oto najważniejsze z nich:

- 1) W całej części pierwszej rozprawy brakuje mi odniesienia do pracy Phys. Rev. B 90, 195102 (2014), gdzie diagram fazowy modelu Kitaeva-Heisenberga został przeskanowany przy pomocy iPEPS-a. Ponieważ

skądinąd jest to metoda pozwalająca na znalezienie nawet stanu podstawowego modelu Hubbarda, zastanawiam się jak wygląda porównanie iPEPS-a z innymi metodami w modelu KH.

- 2) W części drugiej do znalezienia stanu podstawowego używany jest algorytm Lanczosa, co ogranicza badania do skończonych łańcuchów i powoduje konieczność ekstrapolacji w długości łańcucha. Czy DMRG/MPS dla nieskończonego łańcucha nie byłoby właściwszym narzędziem, tym bardziej że jest dostępne w postaci gotowych pakietów? MPS pozwala na łatwe wyliczenie funkcji korelacji a także entropii splątania pomiędzy dwoma nieskończonymi połówkami łańcucha. Wprawdzie z entropią splątania von Neumanna pomiędzy spinami a orbitalami byłoby trudniej, na tyle że trzeba by rozważać ją dla skończonych fragmentów łańcucha, ale można ją zastąpić przez entropię Renyi drugiego rzędu, którą z MPS da się łatwo wyliczyć w granicy termodynamicznej.

Będę wdzięczny za ustosunkowanie się do powyższych komentarzy, ale muszę podkreślić, że ich nieco krytyczny charakter nie umniejsza mojej wysokiej oceny prezentowanej pracy.

Rozprawa została napisana nadzwyczaj starannie, więc nie dopełnię rytuału wytykania błędów edytorskich, których nie udało mi się znaleźć. Praca odznacza się również bardzo atrakcyjną szatą graficzną.

Podsumowując, doskonała rozprawa doktorska pani magister Doroty Gotfryd nie tylko spełnia wszystkie wymogi stawiane tego typu pracom, co pozwala mi wnioskować o dopuszczenie pani Gotfryd do dalszych etapów przewodu doktorskiego, ale także warto rozważyć jej wyróżnienie.

Z poważaniem,

prof. dr hab. Jacek Dziarmaga

