

Prof. dr hab. Tadeusz Domański
Katedra Fizyki Teoretycznej
Instytut Fizyki
Uniwersytet M. Curie-Skłodowskiej
20-031 Lublin

Lublin, 7 października 2023 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej magistra Piotra Wrzoska pt.
**„New insights into the problem of a single hole
in an antiferromagnet”**

Przedłożona rozprawa doktorska ma charakter teoretyczny i analizuje właściwości silnie skorelowanych fermionów w układach o zredukowanej wymiarowości. Tematyka jest aktualnie ważna i może być przydatną do zrozumienia m.in. mechanizmu nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego domieszkowanych tlenków miedzi oraz związków pniktydowych, jak również może być cenną w szerszym kontekście np. do wykazania specyficznej współzależności ładunkowych i spinowych stopni swobody w niskowymiarowych strukturach materii skondensowanej oraz laboratoryjnie wytwarzanych sieciach ultrazimnych atomów. Głównym wątkiem rozprawy doktorskiej jest propagacja pojedynczej dziury na tle podłoża antyferromagnetycznego w jedno- i dwuwymiarowych układach opisanych efektywnym modelem typu t-J. Analizę przeprowadzono przy użyciu zaawansowanych metod fizyki teoretycznej wyznaczając charakterystykę wzbudzeń magnetycznych i ładunkowych, ze szczególnym zwróceniem uwagi na wpływ oddziaływania magnon-magnon. Na podstawie przeprowadzonych obliczeń uzyskano szereg cennych informacji, które pozwalają spojrzeć z nowej perspektywy na kolektywne właściwości niskowymiarowych układów silnie skorelowanych cząstek.

Praca doktorska została przygotowana w Instytucie Fizyki Teoretycznej na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Promotorem rozprawy jest dr hab. Krzysztof Wohlfeld, prof. UW. Treść rozprawy obejmuje pięć rozdziałów oraz podsumowanie. Aktualny dorobek publikacyjny Doktoranta obejmuje cztery artykuły naukowe w czasopismach: SciPost Physics **7**, 066 (2019); Phys. Rev. B **102**, 024440 (2020); Phys. Rev. B **103**, 035113 (2021); Phys. Rev. B **107**, 205103 (2023), monografię dostępną w bazie preprintów arXiv:2203.01846 i kolejną pracę, która jest w trakcie przygotowywania. W dalszej części przedstawię przegląd ważniejszych wyników i postaram się ocenić ich wartość merytoryczną.

Rozdział pierwszy rozprawy doktorskiej (strony 1-32) zarysowuje istotę podjętej problematyki badawczej. Doktorant przedstawił model wędrownych fermionów opisanych hamiltonianem t-J, który jest powszechnie stosowany do opisu domieszkowanej fazy izolatora Motta. Wskazał związek takiego scenariusza z kwazidwuwymiarową strukturą nadprzewodników wysokotemperaturowych, gdzie kluczową rolę odgrywają elektrony d atomów miedzi i elektrony p atomów tlenu. Do empirycznego badania widma wzbudzeń jednocząstkowych wykorzystuje się spektroskopię fotoemisyjną z rozdzielczością kątową, dlatego głównym przedmiotem obliczeń numerycznych była funkcja spektralna jednocząstkowej funkcji Greena. Doktorant przedstawił ideę separacji wzbudzeń spinowo-ładunkowych realizowaną w jednowymiarowych układach silnie skorelowanych elektronów. Zilustrował następnie propagację dziury na tle uporządkowania antyferromagnetycznego w dwuwymiarowym układzie, której towarzyszy chmura magnonów prowadząc do pojawienia się polaronu spinowego. Kolejne fragmenty rozdziału pierwszego przedstawiają formalizm służący do zapisania hamiltonianu modelu t-J w reprezentacji magnonowo-holonowej, korzystając z fermionów pomocniczych (*slave fermions*) oraz transformacji Holsteina-Primakoffa. W języku polaronów spinowych dla modelu t-J pojawiają trzy wyrazy: sprzężenie między operatorami ładunkowych i magnetycznych stopni swobody, wyraz odpowiedzialny za odwracanie spinu oraz efektywne oddziaływanie między magnonami na sąsiednich węzłach. Doktorant wprowadził pomocniczy parametr (λ) skalowania oddziaływań międzymagnonowych, wskazując jego związek z pierwotną reprezentacją spinową modelu t-J (poprzez tzw. *staggered magnetic fields*). W podsumowaniu rozdziału pierwszego Doktorant wskazał główne cele pracy, między innymi podkreślając zamiar skonfrontowania podejścia polaronów spinowych z koncepcją separacji spinowo-ładunkowej w niskoenergetycznym scenariuszu modelu t-J dla wybranych sieci krystalicznych.

W rozdziale drugim przeprowadzono systematyczną analizę widma półzapełnionego układu z pojedynczą dziurą opisanego modelem t-J w wariacie Isinga, tzw. modelem t-J^z. Doktorant skoncentrował się na geometrii układu typu sieci Bethe, rozpatrując przypadki liczby koordynacyjnej $z = 2$ (odpowiadającej zwykłej sieci jednowymiarowej) oraz $z = 4$ (analogicznej do dwuwymiarowej sieci kwadratowej). Wyrażając macierz hamiltonianu w reprezentacji magnonowej, Doktorant wyznaczył postać funkcji Greena i określił charakter widma kwazicząstkowego. W przypadku $z = 2$ macierz przyjmuje postać trójdagonalną, możliwe więc było analityczne (ściśle) wyznaczenie funkcji spektralnej. Bez oddziaływań magnon-magnon widmo składa się z głównego piku kwazicząstkowego oraz sekwencji (drabinki) poziomów o wyższej energii skalowanych według $(J/t)^{\frac{2}{3}}$. W obecności oddziaływań między magnonami stany powyżej piku kwazicząstkowego przekształcają się w kontinuum (rozkład ciągły). Dalsza część drugiego rozdziału dotyczy modelu t-J^z na sieci Bethe o liczbie koordynacyjnej $z > 2$. Wprowadzając bazę stanów n -magnonowych Doktorant określił postać macierzy hamiltonianu i zbadał widmo kwazicząstkowe. Konkretnie wyniki zostały przedstawione dla przypadku $z = 4$, jakościowo

odpowiadającemu dwuwymiarowej sieci kwadratowej. Bez oddziaływań magnonowych widmo składa się z głównego piksu i wyższych stanów (podobnie jak w przypadku $z = 2$), natomiast uwzględnienie oddziaływań wpływa na zagęszczenie stanów drabinkowych. Tak więc, oddziaływanie magnon-magnon zmniejsza koszt energetyczny zaindukowania stanów o wyższych poziomach powyżej piksu głównego. Dla porównania uzyskanych wyników Doktorant przeprowadził analizę widma dla sieci kwadratowej za pomocą samozgodnego przybliżenia Borna (diagramów nieprzecinających się). Ponadto zbadał czy oddziaływanie magnon-magnon wpływa na stan podstawowy. W tym celu dokonał rozwinięcia funkcji falowej stanu podstawowego w bazie stanów magnonowych i oszacował wartość współczynników tego rozwinięcia. W przypadku jednowymiarowym współczynniki zanikają w sposób superexponencjalny, natomiast dla układu kwazidwuwymiarowego zanik jest eksponencjalny (co ilustrują panele a1-d1 na rysunku 2.8). Tego typu właściwości mogłyby być obserwowalne w eksperymentach z ultrazimnymi atomami pułapkowanymi na sieciach optycznych o kształcie odpowiednio wyprofilowanym przez wiązki laserowe. W tym kontekście Doktorant wskazał m.in. na wyniki grupy Marcusa Greinera (ref. [56]).

Rozdział trzeci dyskutuje spektralną charakterystykę pojedynczej dziury na dwuwymiarowej sieci kwadratowej w ramach modelu $t\text{-}J^z$. Wyniki ścisłej diagonalizacji uzyskane dla skończonego układu (20 i 26 węzłów) wykazały obecność dobrze zdefiniowanego piksu kwazicząstkowego, powyżej którego występuje szerokie tło stanów niekoherentnych. Aby zrozumieć źródło pochodzenia tła przeprowadzono obliczenia numeryczne za pomocą przybliżenia *self-avoiding walks* (SAW). Idea takiego podejścia (omówionego w podrozdziale 3.2) posłużyła do wyznaczenia lokalnej funkcji spektralnej zarówno dla geometrii sieci Bethe jak też kwadratowej. Obliczenia numeryczne przeprowadzono dla sześciu przykładowych wartości ilorazu J/t w układzie złożonym z ośmiuset węzłów, uwzględniając zasadniczą rolę magnonów. Wyniki pokazują dobrą zgodność jakościową (rysunek 3.7) oraz ilościową (rysunek 3.8) przybliżenia SAW ze ścisłą diagonalizacją. Bazując na wiarygodności wyników metody SAW dokonano następnie porównania lokalnej funkcji spektralnej w układach o różnych geometriach dla przypadku $J = 0, 4t$ (rysunek 3.9). Zamiast struktury drabinkowej (typowej dla sieci Bethe) dla sieci kwadratowej uzyskano bezstrukturalne szerokie tło. Wykazano ponadto, że tło stanów niekoherentnych pochodzi od oddziaływań magnon-magnon w sieci kwadratowej. Jest to bardzo ważny wniosek, który ma także ogólniejsze odniesienie do układów dwuwymiarowych poza modelem $t\text{-}J^z$.

Kolejny rozdział porusza zagadnienie zależności stanów wzbudzonych pojedynczej dziury w modelu $t\text{-}J^z$ względem parametru J/t . Oprócz typowej zależności $\sim (J/t)^{\frac{2}{3}}$ zaindukowanej wzbudzeniami wibracyjnymi stwierdzono obecność liniowej gałęzi. Szczegółowa analiza przeprowadzona dla dwuwymiarowych układów o geometrii sieci Bethe oraz kwadratowej pozwoliła zidentyfikować źródło pochodzenia gałęzi liniowej jako przejawu niskoenergetycznych modów rotacyjnych. Doktorant przeprowadził modelową analizę wpływu rotacyjnych stopni swobody przy użyciu pomocniczego modelu wykazując, że

hybrydyzacja liniowych modów z gałęzią wzbudzeń wibracyjnych ma związek z łamaniem symetrii C_3 w dwuwymiarowej sieci kwadratowej. Takiego efektu hybrydyzacji nie obserwuje się natomiast na sieci Bethe. W podsumowaniu stwierdził, że na widmo stanów wzbudzonych pojedynczej dziury w scenariuszu półzapełnionego modelu t - J^z składają się: mody wibracyjne o energiach skalowanych według $\sim (J/t)^{\frac{2}{3}}$, mody rotacyjne z liniowym skalowaniem względem J/t oraz kontinuum stanów niekoherentnych zaindukowanych oddziaływaniami między magnonami.

Rozdział piąty dotyczy zagadnienia realizowalności polarytonu spinowego w układach kwazijednowymiarowych opisanych modelem t - J . Na pierwszy rzut oka sformułowanie problemu wydaje się niezasadne. Doktorant w przekonujący sposób udowodnił jednak słuszność takiego intrygującego zjawiska. Przesłanką do wykazania kolektywnej propagacji dziury otoczonej chmurą magnonów są wyniki uzyskane dla modelu t - J zapisanego w bazie stanów magnonowo-holonowych ze skalowaniem wyrazu oddziaływania między magnonami (bezwymiarowym czynnikiem λ). Systematyczna analiza wyników uzyskanych za pomocą ścisłej diagonalizacji dla przypadków $\lambda = 0$ (brak oddziaływań) oraz $\lambda = 1$ (z uwzględnieniem oddziaływań magnonowych w układzie jednowymiarowym) wskazało na kilka subtelnych różnic. Funkcję spektralną nieoddziałującego układu charakteryzuje odseparowanie kwazicząstki najniższej energii od pozostałych wzbudzeń (rysunek 5.3b), zaś w układzie z oddziaływaniem takiej separacji nie ma. W tym drugim przypadku (czyli dla $\lambda = 1$) polaryton spinowy nie jest dobrze zdefiniowaną kwazicząstką z powodu separacji wzbudzeń spinowych od ładunkowych. Aby zrozumieć właściwości stanu podstawowego pod kątem realizowalności polarytonu spinowego Doktorant zbadał 3-punktową funkcję korelacyjną zdefiniowaną wzorem (5.6), która charakteryzuje przestrzenny zasięg porządku antyferromagnetycznego. Porównanie kształtu funkcji korelacyjnej dla $\lambda = 0$ oraz 1 (rysunek 5.5) w zestawieniu z wynikami dla ułamkowych wartości λ (rysunek 5.6) jednoznacznie wskazuje, że polarytony spinowe są stabilne we wszystkich przypadkach z wyjątkiem $\lambda = 1$. Dodatkowe potwierdzenie tej intrygującej właściwości uzyskano na podstawie analizy prawdopodobieństwa liczby magnonów sprzężonych z dziurą (rysunek 5.7). Jako potencjalną płaszczyznę realizacji modelu t - J z oddziaływaniem magnon-magnon przeskalowanym do wartości $\lambda \neq 1$ Doktorant wskazał kwazijednowymiarowe związki tlenków miedzi, w których łańcuchy skorelowanych elektronów są słabo sprzężone między sobą. Uwzględnienie sprzężenia między łańcuchami $J_{\perp}$ daje wówczas wkład do efektywnej skalowanej wartości $\lambda = (1 + J_{\perp}/J)^{-1}$. W ten sposób polarytony spinowe wydają się być stabilnymi kwazicząstkami w realnych układach o wymiarowości pośredniej między $\text{dim}=1$ oraz $\text{dim}=2$.

W podsumowaniu, mgr Piotr Wrzosek przeprowadził systematyczną analizę widma wzbudzeń kwazicząstkowych dla niskowymiarowych układów silnie skorelowanych fermionów opisanych efektywnym modelem t-J i jego wariantem Isinga (tzw. modelem t-J^z). Doktorant wykazał się znajomością wyrafinowanych metod fizyki teoretycznej, między innymi: numerycznej metody ścisłej diagonalizacji, przybliżenia Borna w rachunku diagramowym i podejścia *self-avoiding walks* oraz wykazał znakomitą umiejętność oszacowywania propagatorów kwazicząstkowych w odpowiednio dobranych reprezentacjach (np. z uwzględnieniem rotacyjnych stopni swobody). Dzięki przeprowadzonej analizie Doktorant uzyskał wgląd w naturę niskowymiarowych układów skorelowanych z perspektywy roli magnonów. Wykazał, że poza przypadkiem jednowymiarowego modelu t-J realizuje się stan polarytonu spinowego, zaś oddziaływania międzymagnonowe determinują charakter widma złożonego z pików kwazicząstkowego, wyższych stanów wibracyjnych/rotacyjnych oraz niekoherentnego tła.

Rozprawa doktorska napisana jest klarownym językiem i została bardzo starannie przeredagowana. Zauważyłem jedynie kilka drobnych potnięć edytorskich: (strona 28) *magnons cannot interact with itself* → *magnons cannot interact with themselves*, (podpis pod rysunkiem 3.4 na stronie 43) *bathe* → *Bethe*. Są to jednak mało istotne szczegóły. Na podkreślenie zasługuje niezwykle logiczny tok rozumowania w każdym z omawianych rozdziałów oraz zwięzłe podsumowanie najważniejszych wyników. Bardzo podoba mi się również ostatni rozdział (*Summary*), w którym zestawiono listę oryginalnych wniosków i skonfrontowano z dotychczasowym stanem wiedzy.

Rozprawa doktorska magistra Piotra Wrzoska wnosi istotny wkład w zrozumienie unikalnych właściwości niskowymiarowych układów silnie skorelowanych fermionów. Doktorant wykazał się dużą dozą profesjonalizmu w korzystaniu z zaawansowanych metod fizyki teoretycznej oraz dogłębnym zrozumieniem specyfiki współzależności ładunkowych i spinowych stopni swobody w scenariuszach opisanych hamiltonianem modelu t-J na sieciach o różnych geometriach i wymiarowościach. Przedłożona rozprawa spełnia zwyczajowe i prawne wymagania określone w Ustawie *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późniejszymi zmianami) do nadania stopnia doktora w dyscyplinie *nauki fizyczne*. Na tej podstawie wnioskuję do Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Fizyczne Uniwersytetu Warszawskiego o dopuszczenie pana magistra Piotra Wrzoska do publicznej obrony oraz dalszych etapów Jego przewodu doktorskiego. Uwzględniając oryginalny sposób podejścia do opisu silnie skorelowanych układów niskowymiarowych w reprezentacji spinowo-holonowej i bogactwo zastosowanych metod (numerycznych, diagramowych oraz oszacowań analitycznych) wnioskuję ponadto o wyróżnienie przedłożonej pracy doktorskiej.