



UNIWERSYTET  
JAGIELLOŃSKI  
W KRAKOWIE

## **Recenzja rozprawy doktorskiej zatytułowanej „Electronic and magnetic properties of low-dimensional strongly correlated multiorbital systems”**

doktorant: mgr inż. Maksymilian Środa

promotor: dr hab. Jacek Hebrych

Instytut Fizyki Teoretycznej

Zakład Teorii Materii

Skondensowanej i Nanofizyki

### **1. Charakterystyka ogólna rozprawy**

Rozprawa została przedstawiona Radzie Dyscypliny Nauki Fizyczne przy Politechnice Wrocławskiej, składa się z ogólnego omówienia tematyki oraz wyników uzyskanych przez doktoranta oraz załączonych czterech prac oryginalnych, z których trzy zostały już opublikowane w renomowanych ogólnościatowych czasopismach naukowych: dwie w Physical Review B i jedna w Nature Communications. Każdy z tych pięciu oryginalnych publikacji zawiera osobno krótkie omówienie merytoryczne. Pod względem bibliograficznym, doktorant jest pierwszym autorem w dwóch z tych czterech publikacji. Także, wszystkie prace są współautorskie, przy czym zespół zawiera od trzech do siedmiu autorów, w zdecydowanej większości znakomitych teoretyków |w zakresie silnie skorelowanych układów fermionowych. Rozprawa spełnia w pełni wymogi formalne stawiane rozprawom doktorskim w odpowiedniej ustawie o stopniach i tytule naukowym. Z tego powodu już na początku stawiam wniosek o dopuszczenie Pana mgr inż. Maksymiliana Środę do dalszych etapów procedury uzyskania stopnia doktora w dyscyplinie nauki fizyczne, w tym do jej publicznej obrony. Poniżej charakteryzuję główne cechy oraz wyniki uzyskane przez doktoranta w okresie jego kształcenia w szkole doktorskiej. Na podkreślenie zasługuje wyszczególnienie wkładu doktoranta do wspólnych publikacji z pozostałymi współautorami.

Prof. dr hab. Józef Spałek

e-mail:

[jozef.spalek@uj.edu.pl](mailto:jozef.spalek@uj.edu.pl)

tel.: 12 664-46-85

### **2. Tematyka rozprawy**

Tematyką rozprawy jest określenie własności równowagowych i dynamicznych w wieloorbitalowym modelu Hubbarda-Kanamori dla układów niskowymiarowych.

ul. St. Łojasiewicza 11

PL 30-348 Kraków

Metodami formalnymi są grupa renormalizacji macierzy gęstości oraz ścisła diagonalizacja (metoda Lanczosa). Jako wyniki doktorant otrzymuje blokowo-spinowe uporządkowanie dla układów z częściową (orbital-dependent) lokalizacją w układach dwu- i trój-orbitalowych 3d, a także w żelazowych nadprzewodnikach wysokotemperaturowych. Z analizy rozdziałów 1 oraz 2 nasuwają mi się następujące wnioski krytyczne. Po pierwsze diagram fazowy przedstawiony na rys. 1.2 dla przypadku nadprzewodników wysokotemperaturowych z miedzią (tzw. miedzianów) jest niepełny, gdyż nie uwzględnia uporządkowania fali gęstości ładunku (np. p-CDW). Rozumiem, że to rysunek poglądowy. Niemniej, na tym przykładzie uwydatnia się, w pełnej krasie, pojawienie się wielu konkurencyjnych faz, co jest cechą charakterystyczną układów silnie skorelowanych, gdyż występuje tu jednocześnie konkurencja kilku procesów kwantowych na tej samej skali energii: zrenormalizowanego hoppingu elektronów, oddziaływań wymiany (kinetycznej) oraz resztkowych silnych oddziaływań (wyraz Hubbarda  $U$  lub Hunda  $J^H$ , w tym drugim przypadku dla układów z orbitalną degeneracją). Oprócz tego, stan metaliczny dla dużego domieszkowania, tj. dla przypadku, gdy nadprzewodnictwo zanika, nie jest stanem „normalnego metalu”, bo chociażby wtedy układ wykazuje zależność temperaturową oporności elektrycznej  $\sim T^2$ , a więc oddziaływania elektronowe czy kwantowe fluktuacje spinowe są tam obecne. Jest to zatem, w najlepszym przypadku ciecz Fermiego-Landaua.

W końcu, nieprawdziwym stwierdzeniem jest to na dole str. 5, że najważniejszym mechanizmem parowania ma to miejsce poprzez fluktuacje spinowe. Przede wszystkim są to silne korelacje w połączeniu z oddziaływaniami między spinami spinowe w przestrzeni rzeczywistej, a powoływanie się jedynie na prace Scalapino czy Chubakova uważam za dalece niewystarczające. Oczywiście, wszystkie te uwagi nie mają ważnego wpływu na zasadnicze wyniki rozprawy, niemniej jednak czuję się w obowiązku przede wszystkim uwypuklić je. Rozumiem, że być może doktorant ma na myśli nadprzewodniki żelazowe, które nie są układami silnie skorelowanymi w ścisłym sensie. W związku z tym poproszę doktoranta o wyjaśnienie w trakcie publicznej obrony, jakie są zasadnicze różnice między miedzianami a żelazowcami z ogólnego punktu widzenia (pomijam tutaj ich jednopasmowość *versus* wielopasmowość). Zdaniem autora tych słów

koncepcja „RVB” Andersona często prowadzi do konfuzji przy stosowaniu jej do opisu stanu nadprzewodzącego; jest natomiast przydatna do opisu niestandardowego stanu magnetycznego w dwóch wymiarach bez uporządkowania dalekiego zasięgu, aczkolwiek dla niskiego domieszkania obserwuje się stan kwantowego antyferromagnetyka trójwymiarowego (vide prace Chakravarty i Halperina, etc.).

W tej rozprawie doktorant wychodzi z wieloorbitalowej wersji modelu Hubbarda (model Hubbarda-Kanamori) w którym b. ważną rolę, oprócz bezpośredniego odpychania Kulombowskiego wewnątrzatomowego, odgrywa także wewnątrzatomowe międzyorbitalowe ferromagnetyczne oddziaływanie wymienne, tzw. reguła Hunda. W takim modelu wieloorbitalowość może prowadzić do selektywnego orbitalnie przejścia Motta-Hubbarda, natomiast konkurencyjny charakter oddziaływania magnetycznego Hunda z antyferromagnetycznym oddziaływaniem międzyatomowym kinetycznej wymiany prowadzi tutaj do nowych stanów magnetycznych o charakterze mieszanych bloków ferro- i antyferromagnetycznych.

Doktorant pokazuje, używając metody grupy renormalizacji dla macierzy gęstości, która z kolei nadaje się do analizy prawie wyłącznie układów jednowymiarowych oraz kwazi-jednowymiarowych takich jak drabinki z złożone z dwóch skończonych łańcuchów, że tworzenie się takich stanów czy faz, rzeczywiście, ma miejsce. Przejdę teraz do bardziej szczegółowego omówienia poszczególnych prac stanowiących zasadniczą część rozprawy, a następnie do uwag krytycznych na temat formalnego podejścia do rozważanych problemów.

### 3. Omówienie szczegółowych wyników

**Rozdział 2** nie jest zilustrowany konkretną publikacją, zawiera jako jedyną analizę ogólną stanu nadprzewodzącego i selektywnego orbitalnego przejścia Motta-Hubbarda w ramach trójorbitalowego modelu Hubbarda-



Kanamori dla przypadku łańcucha i skończonej drabinki. Taki model jest użyty do analizy nadprzewodzących związków z żelazem, a konkretnie do układu drabinkowego  $\text{BaFe}_2\text{S}_3$ , dla którego wykryto stan nadprzewodzący z temperaturą krytyczną  $T_0 = 24 \text{ K}$  przy ciśnieniu  $p = 11,6 \text{ GPa}$ . Dodatkowo, związki typu  $\text{BaFe}_2\text{S}_4$  posiadają strukturę łańcuchową atomów Fe. Na rys. 2.4 przedstawiono przykładowy diagram fazowy dla serii układów typu  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  na płaszczyźnie T-x oraz T-p i pokazano w ten sposób, że jest on w dużej mierze analogiczny do tego otrzymanego dla kupratów (związków z miedzią). Uderzający jest przedział koncentracji, mający charakter kopuły, ze stabilnym stanem nadprzewodzącym. Oznaczać to może parujący charakter elektronów w przestrzeni rzeczywistej, jak to ma też miejsce dla kupratów. Dodatkowo, w obszarze małego domieszkowania występuje stabilny antyferromagnetyzm z wysoką maksymalną temperaturę Néela ok. 150 K, znowu analogicznie do związków miedzi. Jednakże, występują znaczne różnice, a mianowicie uporządkowanie nadprzewodzące ma symetrię  $s_{\pm}$ , a nie  $d_{x^2-y^2}$ , jak jest w miedzianach. Poza tym, w początkowym okresie badań warstwowych związków żelazowych uważano, że stan antyferromagnetyczny (przy niskim domieszkowaniu) jest typu fali gęstości spinowej (SDW), a nie zlokalizowanych spinów. Oznaczałoby to, że na układy te są wtedy izolatorami Slatera, a nie Motta, czyli, że elektrony 3d są tutaj niezlokalizowane i układ jest metaliczny powyżej temperatury Néela. Czy mam rację? Proszę o uściślenie tego aspektu. W takim przypadku, układy te są ulokowane jako układy z elektronami wędrownymi nawet w fazie izolatora (czyli półprzewodnika) Slatera i stąd fluktuacje spinowe (odpowiednio znormalizowane) mogą stanowić źródło parowania elektronów w przestrzeni pędów, a nie silne korelacje i oddziaływania wymienne bezpośrednio w przestrzeni rzeczywistej, jak to ma miejsce w miedzianach. Te uwagi świadczą też o mojej konfuzji, jeśli chodzi o te układy i umieszczenie ich w tej samej klasie, co układy z miedzią. Dodatkowo, doktorant twierdzi, że w przypadku drabinek utworzonych z materiałów z żelazem może mieć miejsce orbitalowo selektywne przejście Motta. Jak więc wygląda ta sytuacja dla różnych układów z żelazem? Jestem pewien, że doktorant wyjaśni mi te moje braki czy konfuzję w rozumieniu tych układów.

W końcu, trzy dodatkowe uwagi dotyczące wyników w tym rozdziale. Pierwsza, bardzo pouczający jest rys. 2.9, ilustrujący diagram fazowy dla  $T = 0$  na płaszczyźnie  $J/U$  vs.  $U/D$  otrzymany w przybliżeniu połączonym podejściu średniego pola (slave-spin) i DMFT. Czy jest to oryginalny wynik autora, czy zaadoptowany z prac L. De Medici i współpracowników? Jest to ważny wynik, stąd moje pytanie.

Druga uwaga dotyczy pojęcia metalu Hunda. Osobiście rozumiem to pojęcie jako przypadek kiedy wkład do energii całkowitej układu pochodzący od oddziaływania Hunda jest porównywalny z tym pochodzącym od wkładu od wyrazu Hubbarda,  $\sim U d^2$  (por. np. E. Kądzielawa-Major et al., PRB **97**, 224519 (2018)). Czy tak jest także tutaj?

Trzecia uwaga dotyczy Hamiltonianu efektywnego (2.6) typu Kondo-Heisenberga, w którym elektrony skorelowane są rozdzielone na dwie części – zlokalizowaną i wędrowną. To bardzo ciekawa koncepcja, gdyż upraszcza analizę algebraiczną i numeryczną, a także pozwala na znalezienie relacji z innymi modelami typu sieci Kondo czy modelu s-d, aczkolwiek jego postać może być niekompletna i stanowić przedmiot dalszej dyskusji.

**Rozdział 3** zawiera oryginalną analizę tzw. blokowego magnetyzmu oraz niekolinearnego uporządkowania spinowego w oparciu o modele Hubbarda-Kanamori i Kondo-Heisenberga, w których autor omawia szczegółowo uporządkowanie spinowe drabinek spinowych (patrz na rys. 1 w publikacji), a także funkcje spektralne, a szczególnie wypadkową strukturę pasmową i wynikający z tej analizy diagram fazowy na płaszczyźnie oddziaływanie Hubbarda  $\sim U$  – wypełnienie  $n$ /pasma wędrownych elektronów w drabince i względne drabinek. Szczególnie interesujące są korelacje chiralne prowadzące do niezerowego strumienia spinowego w zamkniętych podukładach szczebel-poprzeczek. Praca została opublikowana (M. Środa et al., PRB **104**, 045128 (2021)); uważam, że wnioski tam podane są bardzo interesujące i ważne.

**Rozdział 4** zawiera inne zastosowanie modelu Kondo-Heisenberga, a mianowicie doktorant rozważa łańcuch liniowy opisany tym modelem

położony na nadprzewodniku typu s. To klasyczna sytuacja do rozważenia topologicznego przejścia fazowego i krawędziowych stanów Majorany dla orbitalowo selektywnego izolatora Motta. Przejście topologiczne objawia się pojawieniem powiązanych modów na krawędziach łańcucha w postaci modu zerowego Majorany. Sygnaturą ich obecności jest pojawienie się pików w lokalnej gęstości stanów wraz ze spiralnym uporządkowaniem spinów powyżej krytycznej wartości parametru  $\sim U$  (Hubbarda). Istnieje kilka sposobów realizacji modów zerowych Majorany (MZM). Doktorant wybiera drabinę spinową położoną na nadprzewodniku żelazowym typu 123, w której występuje dodatkowe uporządkowanie spiralne. Problem jest analizowany szczegółowo numerycznie w metodzie grupy renormalizacji dla macierzy gęstości (DMRG), a wyniki opublikowane w Nature Communications w 2021r.

**Rozdział 5** zawiera preprint pracy zgłoszonej do publikacji w Nature Communications, w której doktorant odgrywa rolę pomocniczą. Publikacja dotyczy przejścia Haldane'a zaindukowanego korelacjami elektronowymi dla wypełnienia układu wieloorbitalowego do połowy. Także, sytuacja jest powiązana z pojawieniem się fazy Haldane'a w łańcuchu Heisenberga ze spinem  $S=1$ , tutaj rozpatrywana dla modelu dwuorbitalowego. Takie przejście jest sygnalizowane pojawieniem się modów brzegowych ze spinem  $S=1/2$  dla stosunkowo małej wartości parametru  $\sim U$  Hubbarda, zanim momenty spinowe są uformowane pełni w postaci ich wartości  $S=1$ . Taka sytuacja tworzy nowe pole do badań modów Haldane'a dla układów wędrownych elektronów. Specyficzne typy uporządkowania, a także subtelne własności topologiczne stanu Haldane'a są w tym przypadku zamodelowane modelem dwuorbitalowych wędrownych fermionów, a także przedyskutowano przejście do granicy zlokalizowanych spinów Haldane'a. W szczególności, zbadano asymptotyczne zachowanie specyficznej przerwy spinowej Haldane'a w funkcji parametrów mikroskopowych modelu. Praca jest w całości numeryczna i dość hermetyczna, ale z pewnością wartościowa, gdyż adresuje przejście takiego układu wędrownego do zlokalizowanego, co może być uważane jako analogia do przejścia Motta w przypadku uwzględnienia topologii. Czy tak jest?



**Rozdział 6** stanowi druga praca opublikowana niedawno (PRB **108**, L081102, (2023)), w której doktorant jest pierwszym autorem. Dotyczy ona tworzenia się tzw. pasm energetycznych Hunda w układach wieloorbitalowych. Pasma te charakteryzują się tym, że ich szerokość jest określona w głównej mierze przez wielkość całki wymiany ferromagnetycznej Hunda. Posiadają one obszary satelitarne, w których rolę odgrywa oddziaływanie  $\sim U$  Hubbarda. Pasma te powstają z dyskretnych stanów multipletowych układów wieloorbitalowych np. w sytuacji, gdy całki hoppingu  $t$  nie są duże, a całka wymiany Hunda relatywnie duża. Praca zawiera piękną szczegółową interpretację fizyczną wyników.

**Rozdział 7** zawiera podsumowanie rozprawy i konkluzje. Wyniki dotyczą trzech problemów (i) orbitalowo selektywne przejście Motta-Hubbarda wraz z opisem struktury i własności skorelowanych w jego pobliżu; (ii) stan Majorany i fazy Haldane'a; (iii) stany blokowe spinów kolinearnych oraz ich własności spektralnych.

Wszystkie omawiane problemy dotyczą skończonych drabinek lub łańcuchów fermionowych, potraktowanych w ramach modelu wieloorbitalowego Hubbarda-Kanamori lub jego wersji efektywnej z orbitalem zlokalizowanym, czyli w modelu Kondo-Heisenberga. Prace są krótkie i zawierają materiał uzupełniający (Supplementary Material). Rozwiązania numeryczne tych problemów są wykonane metodą grupy renormalizacji macierzy gęstości (DMRG), która została zastosowana do układów fermionowych o rozmiarze  $L \sim 10^2$  węzłów. Autor korzystał częściowo z kodów współautorów.

Praca stanowi solidny wkład do teorii skorelowanych układów fermionowych z niestandardowym uporządkowaniem spinowym nielokalnym. Trudno mi jednak powiedzieć, w jakim stopniu wyniki dotyczące uporządkowania są realistyczne, gdyż brakuje mi tutaj systematycznego porównania z rozwiązaniami dla nieskończonych odpowiedników: analizy typu średniego pola, a także z tymi wynikającymi z rozwiązań metodą wariacyjną czy

DMFT. W końcu, autor nie wspomina prawie w ogóle o metodzie wyznacznikowego kwantowego Monte Carlo. Czy są one niemożliwe do zastosowania dla skorelowanych układów wieloorbitalowych, np. ze względu na trudności numeryczne? Dyskusja, chociażby ogólna, charakterystyki obecnej metody w świetle innych konkurencyjnych podejść byłaby wskazana. Jest to potrzebne, gdyż, jak wiemy, analiza skończonych układów nie dostarcza pewnych rozwiązań opisujących takie własności jak dla układów nieskończonych. Proszę o komentarz na ten temat.

Uwaga formalna: Praca [05]: M. Mierzejewski i współpracownicy PRB **102**, 161111(2020), nie jest ujęta w tekście rozprawy, więc jej nie analizowałem. Jest tak, ponieważ sam doktorant ignoruje jej analizę w tekście rozprawy. Jej uwzględnienie w wykazie prac wchodzących w skład rozprawy jest niepotrzebne i mylące, przyjemniej dla mnie.

Biorąc pod uwagę całość rozprawy, część opisową i załączone cztery oryginalne prace, uważam, że przedstawiona rozprawa spełnia wymogi określone w przepisach ustawy o stopniach i tytule naukowym i wnioskuję o dopuszczenie Pana mgr. Inż. Maksymiliana Środę do dalszych etapów procedury w celu nadania mu stopnia naukowego doktora w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki fizyczne.



Józef Spałek

profesor zwyczajny nauk fizycznych

Kraków, 08/09/2023