

dr hab. Krzysztof Wohlfeld
Instytut Fizyki Teoretycznej
Uniwersytet Warszawski
ul. Pasteura 5, 02-093 Warszawa
krzysztof.wohlfeld@fuw.edu.pl
<http://www.fuw.edu.pl/~kwohlfeld>

Warszawa, 26/9/2023

**Recenzja pracy doktorskiej p. Maksymiliana Środy
pt. „Electronic and magnetic properties of low-dimensional
strongly correlated multiorbital systems”**

Przedstawiona przez p. Maksymiliana Środę praca dotyczy fizyki modelu Hubbarda z więcej niż jednym aktywnym orbitalem (tzw. wielo-orbitalny model Hubbarda). Jest to oczywiście bardzo szeroka grupa zagadnień, rozważanych od wielu lat – por. efektywne modele typu Kugla-Khomskiego zapostulowane ponad 40 lat temu. Tym niemniej, wciąż jest ona warta studiów. Wynika to, z jednej strony, z odkrywania nowych klas materiałów skorelowanych z orbitalnymi stopniami swobody (takich jak, dyskutowane w tej pracy związki żelazowe czy też, bardziej niedawno, nadprzewodzące tlenki niklu). Z drugiej zaś strony, duży postęp w metodach numerycznych pozwolił na pogłębione badania takich modeli. Bardziej szczegółowo, doktorant koncentruje swoje badania wokół niskowymiarowych układów (drabina, łańcuch) opisywanych (przede wszystkim) dwu-orbitalnymi modelami Hubbarda i (przeważnie) wykazującymi tendencje do selektywnej lokalizacji jednego z orbitali (przejście Motta w jednym z orbitali – tzw. „orbital selective Mott phase”, OSMP). Przedstawione badania mają na celu zarówno lepsze zrozumienie materiałów (prace [O1, O2] w doktoracie) jak i pozwalają na wyjaśnienie podstawowych efektów zachodzących w takich układach (prace [O3, O4] w doktoracie). Od razu podkreślę, że tematyka pracy jest bardzo spójna, zwłaszcza jeśli wziąć pod uwagę, że jest to generalnie zbiór prac opublikowanych (względnie wysłanych do druku) w bardzo dobrych czasopiśmiech. Jest to rzadka cecha, bowiem często w prace doktorskie *albo* są spójne *albo* są poparte bardzo dobrymi pracami.

Sama praca składa się z 7 rozdziałów, przy czym 3 to dwa wstępy i konkluzje, a 4 referują oryginalne wyniki z opublikowanych prac [O1-O4]. Układ pracy jest przejrzysty, co jest spowodowane m.in. krótkimi wstępami poprzedzającymi każdy z oryginalnych wyników prac [O1-O4], a następnie przeklejeniem tychże prac. Ponadto taka forma doktoratu, w moim odczuciu, jest optymalna w dzisiejszych czasach. Zanim przejdę do krytycznego opisu każdego z rozdziałów opisujących oryginalne wyniki, zaznaczę, że rozdziały wstępne zostały napisane bardzo sprawnie i ciekawie. W szczególności bardzo dobrym pomysłem było napisanie najpierw wstępu do podstaw fizyki tlenków miedzi, a dopiero później wprowadzenie nadprzewodników żelazowych.

Rozdział trzeci jest pierwszym rozdziałem referującym oryginalne wyniki – w oparciu o pracę [O1]. Ze względu na to, że, w moim odczuciu, przedstawiona w tym rozdziale fizyka, jest stosunkowo najprostsza, stanowi on też pewnego rodzaju wprowadzenie do zagadnień dyskutowanych w następnych rozdziałach. Generalnie głównym celem tej pracy jest zrozumienie jak stabilność różnych, czasami dość specyficznych, uporządkowań magnetycznych w drabinach opisywanych dwu-orbitalnym modelem Hubbarda w reżimie „OSMP” zależy od parametrów hamiltonianu. W tym

celu rozważany jest uproszczony hamiltonian, tzw. uogólniony model Kondo-Heisenberga („generalized Kondo-Heisenberg”, dalej gKH), który składa się z antyferromagnetycznego oddziaływania pomiędzy zlokalizowanymi spinami oraz ferromagnetycznego oddziaływania Hunda pomiędzy elektronami zlokalizowanymi i wędrującymi (ponadto model ten posiada również oddziaływanie pomiędzy elektronami). Model ten należy do klasy problemów typu podwójnej wymiany, dobrze znanej z popularnych około 20 lat temu studiów nad tlenkami manganu. Problemy te z reguły prowadzą do „bogatych” diagramów fazowych z wieloma uporządkowaniami magnetycznymi, co jest wynikiem współzawodnictwa pomiędzy antyferromagnetycznym oddziaływaniem spinów „rdzenia” oraz ferromagnetycznym tendencją wyindukowaną przez poruszające się spiny. Nie inaczej jest i w tym przypadku: diagram fazowy przedstawiony w Fig. 4 w pracy [O1] zawiera wiele faz, których natura i pochodzenie jest szczegółowo omówione w pracy. Dyskusja ta jest poprowadzona bardzo dobrze. Jedyne co mi umknęło, a pewnie przydałoby się w pracy doktorskiej, to może przystępne omówienie (w samej treści rozdziału trzeciego, nie w pracy [O1]) przyczyny powstania blokowego antyferromagnetyka, gdy obsadzone jest tylko jedno pasmo. Wynik ten jest (jakościowo) znany z wcześniejszych prac dla łańcucha, ale warto byłoby go, z przyczyn dydaktycznych, wyjaśnić w pracy doktorskiej. Z niniejszą pracą mam związane tylko jedno pytanie (**pytanie 1**): prosiłbym o dyskusję (wraz z uzasadnieniem) jakie obsadzenia w modelu gKH odpowiadają żelazowym chalcogenkom o strukturze 1-2-3.

Z kolei rozdział czwarty, referujący i zawierający pracę [O2], dotyka, bardzo modnego ostatnio, zagadnienia związanego z poszukiwaniem fermionów Majorany (a dokładniej modów zerowych Majorany, MZM) w realistycznych układach. By wyobrazić sobie jak duże jest współzawodnictwo pomiędzy grupami pracującymi nad tym tematem, warto zaznaczyć, że związane z tym problemem jest m.in. wycofywanie (z topowych czasopism) wielu artykułów dot. tego problemu, z powodu niekompletnych, względnie fałszywych danych. Bardziej szczegółowo, praca [O2] proponuje istnienie MZM w układzie składającym się z łańcucha (względnie drabiny) opisywanym modelem gKH oraz oddziałującego z nim 2D nadprzewodnika typu BCS. Faktycznie, jak zostało to omówione w [O2], wzajemne oddziaływanie pomiędzy tymi dwoma podukładami może prowadzić do stabilizacji MZM. Kluczowa sprawa, warunkująca powstanie MZM, jest tutaj spiralny porządek magnetyczny, który to może być stabilnym stanem podstawowym dla niektórych parametrów podukładu gKH. Bodaj najciekawszą cechą tego układu jest fakt, że spiralny porządek magnetyczny może istnieć tutaj w układzie kwantowym, z wędrującymi elektronami, jak to pokazano zresztą w pracy [O1]. Realistycznie, układ taki można stworzyć w heterostrukturze złożonej z żelazowego chalcogenku 1-2-3 oraz konwencjonalnego nadprzewodnika.

Najbardziej doniosłe wyniki, w moim odczuciu, zostały przedstawione w rozdziale piątym, napisanym w oparciu o pracę [O3]. W tym przypadku, badany problem również dotyczył możliwości indukowania fazy topologicznej poprzez oddziaływanie pomiędzy elektronami. W tym celu, rozważany był bodaj najbardziej znany skorelowany układ wykazujący nietrywialną topologię w pewnej granicy: dwu-orbitalny model Hubbarda z (przeciętnie) dwoma elektronami na miejsce. Jest to spowodowane tym, że hamiltonian tego modelu, w przypadku oddziaływania Hubbarda U dużo większego niż szerokość pasma elektronowego W , można zmapować na 1D model Heisenberga o spinie $S = 1$. Ten ostatni układ, z kolei, realizuje „słynną” fazę Haldane’a, z przerwą we wzbudzeniach i z nielokalnym parametrem porządku świadczącym o nietrywialnej topologii, tzw. „string order parameter”. Natomiast, przed ukazaniem się wyników [O3], nie było jasne jaki jest los tej nietrywialnej fazy, gdy oddziaływanie U jest zmniejszane. W szczególności, można było się spodziewać, że faza ta umiera, gdy model Hubbarda wchodzi w fazę wędrowną (tzn. wielkość fluktuacji ładunkowych jest porównywalna z momentem magnetycznym). Praca [O3] pokazuje, w przekonujący sposób, że taka intuicja zawodzi. Okazuje się bowiem, że nawet dla względnie słabego oddziaływania Hubbarda, np. $U \sim W$, dalej mamy nietrywialną topologię w układzie – co widać poprzez nieznikanie „string order parameter” jak również (np.) skończoną przerwę

energetyczną. Co ciekawe (i istotne), gdy $U \sim W$ to stan podstawowy wykazuje typowe cechy układu wędrownego a wzbudzenia wyglądają (prawie) tak jak w przypadku braku oddziaływań – tzn. raczej trudno mówić o zdefiniowanych dobrze magnonach, jak w przypadku 1D modelu Heisenberga o spinie $S = 1$. Tutaj pojawia się ciekawe zagadnienie, na ile tak naprawdę natura stanów wzbudzonych dla $U \sim W$ różni się od tych w modelu Heisenberga dla $S = 1$ – czy jednak może jakościowo (ale nie ilościowo) są one takie same? Być może jest to ciekawy kierunek badań w przyszłości (tzn. jest to pewnie raczej pytanie retoryczne w tym momencie i nie oczekuję by Doktorant na nie odpowiadał).

Patrząc na pracę [O3] *a posteriori*, może się wydawać, że takie badania są dość naturalne, bowiem możnaby uznać, iż „każdy mógł je wykonać”. Jednakże problem leży w tym, że trzeba było zaproponować taki problem, a następnie wszystko policzyć. Zatem łącznie sytuacja nie jest trywialna, w szczególności doktorant wykonał istotne obliczenia dot. „string order parameter”, które to były kluczowe w identyfikacji fazy Haldane’a dla $U > U_c$.

Pewnie najbliższy moim zainteresowaniom jest rozdział szósty, napisany w oparciu o pracę [O4]. Powracamy tutaj znów do podstawowych własności wielo-orbitalnego modelu Hubbarda oraz modelu gKH. Tym razem jednak Doktorant skupia się na własnościach spektralnych tych modeli – oraz rozważa (przede wszystkim) układ jednowymiarowy. Głównym wynikiem jest tutaj fakt, że jednocząstkowa funkcja spektralna, która może być obserwowana w eksperymentach PES oraz IPES, składa się *nie tylko* z pasm Hubbarda, ale również z tzw. pasma Hunda. *A priori*, wynik ten nie powinien zaskakiwać: więcej stopni swobody w modelu wieloorbitalnym (niż w Hubbardzie) może prowadzić do dodatkowego pasma. Tym niemniej nietrywialne jest to, że w przypadku gdy istnieją silne fluktuacje ładunkowe, to energia tego pasma zależy tylko od oddziaływania Hunda – a nie Hubbarda. W pracy [O4] zostało to bardzo ładnie wyjaśnione w tzw. granicy atomowej: otóż, zakładając, że stan podstawowy jest podwójnie zdegenerowany, tzn. składa się z dwóch dwu-orbitalnych stanów o różnych obsadzeniach, można pokazać, że wzbudzenia ładunkowe z takich stanów mogą nie kosztować energii związanej z odpychaniem kulombowskim W tym miejscu od razu nasuwa mi się **pytanie 2** do Doktoranta: otóż chciałbym prosić o to aby ww. rozumowanie, w pracy przedstawione przy pomocy Fig. 2(b), wyjaśnić przy pomocy obliczeń typu „back-of-the-envelope” (tzn. chciałbym zobaczyć obliczenie funkcji spektralnej dla modelu gKH przy domieszkowaniu $n = 1.5$ w granicy atomowej, tj. braku hoppingów). Kolejno (**pytanie 3**), chciałbym też prosić o pewną próbę wyjaśnienia zupełnie innych relacji dyspersji (jak również „koherencji” tj. wkładu od kwazicząstki do obserwowanego widma dla danego pasma) dla pasma LHB oraz pasma Hunda i pasma UHB: czy da się taką sytuację intuicyjnie zrozumieć?

Ciekawe jest też to, że powyższa fizyka „przeżywa” również dla tzw. współmiernego („commensurate”) domieszkowania – pod warunkiem, że fluktuacje ładunkowe są na tyle „duże”, iż w stanie podstawowym mamy wkłady od stanów z różnymi obsadzeniami. Nie jest jednak dla mnie całkiem jasne jak duże musi być U (względem oddziaływania J_H) by jednak pasmo Hunda przestało być widoczne dla współmiernego domieszkowania – byłbym wdzięczny za wyjaśnienie tego podczas obrony, najchętniej na przykładzie modelu dwuorbitalnego i znikania „kanonicznego” pasma sin-gletowego (**pytanie 4**). Wyniki pracy [O4] zainspirowały mnie też do postawienia nieco bardziej ogólnego pytania Doktorantowi (**pytanie 5**): otóż interesuje mnie, jak niniejsza praca wpisuje się w szeroko dyskutowany (przez L. de Medici, J. Mravlje, A. Georges *et al.*) paradygmat tzw. „Hund’s metals”? Czy obecność pasma Hunda definiuje „Hund’s metal” (pewnie jeszcze trzeba by dodać, że układ musi być metalem)? Czy może istnieć „Hund’s metal” bez pasma Hunda? Nota bene, na stronie 96 doktoratu ten problem jest w pewnym stopniu dyskutowany – ale wolałbym by nieco precyzyjniej sformułować niniejszą relację.

Warto następnie podkreślić, że uzyskane wyniki zostały opublikowane w postaci trzech artykułów: dwóch w Physical Review B (jeden w sekcji Letters) oraz jednego w Nature Communications. Ponadto, prawdopodobnie najbardziej doniosły artykuł ([O3]), został wysłany do Nature Communi-

cations. Oznacza to, że otrzymane wyniki nie tylko zostały zaakceptowane jako „wiarygodne” przez ekspertów, ale też zostały one uznane za wystarczająco ciekawe by mogły zostać opublikowane w naprawdę dobrych czasopismach. P. Środa jest pierwszym autorem dwóch bardzo złożonych prac – ale w pozostałych również odegrał istotną rolę (jak zostało to szczegółowo opisane na stronie vii doktoratu). Powyższe fakty wskazują na to, że mamy do czynienia z bardzo solidną pracą doktorską, która w moim odczuciu zdecydowanie przewyższa poziom doktoratów w Polsce. Ponadto osobiście uważam, że wynik pracy [O3] jest doniosły. Dlatego wnioskuję o wyróżnienie niniejszej pracy doktorskiej.

Na koniec zaznaczę, że również styl przedstawienia wyników w rozprawie doktorskiej jest bardzo zadowalający. Praca jest krótka, ale treściwa, tzn. dokładnie opisuje to co konieczne nie zawierając nieistotnych, i potencjalnie utrudniających czytanie, dyskusji. Dla porządku dodam, że rozprawa praktycznie nie zawiera literówek i niezręczności językowych.

Podsumowując, stwierdzam, że przedstawiona rozprawa doktorska z dużym naddatkiem spełnia wszystkie wymogi formalne stawiane tego typu pracom. Wnioskuję o **dopuszczenie p. Maksymiliana Środy do dalszych etapów przewodu doktorskiego oraz o wyróżnienie niniejszego doktoratu.**



/Krzysztof Wohlfeld/