UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

INSTYTUT FIZYKI IM. MARIANA SMOLUCHOWSKIEGO
Zakład Teorii Materii Materii Skondensowanej i Nanofizyki

dr hab. Adam Rycerz

E-mail: rycerz@th.uj.edu.pl
WWW: http://th.if.uj.edu.pl/~adamr/

Kraków, 23 kwietnia 2018

Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr. Wojciecha Brzezickiego pt. "Spinowy, orbitalny i topologiczny porządek w modelach silnie skorelowanych elektronów"

Przedstawiona do oceny rozprawa habilitacyjna ma formę monotematycznego zbioru jedenastu artykułów naukowych, opublikowanych w latach 2012-2018, a wykonanych częściowo w zespole Prof. Andrzeja Michała Olesia w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego, a częściowo w zespole Dr. Mario Cuoco w Instytucie CNR-SPIN w Fisciano (Salerno) we Włoszech. Prace wchodzące w skład rozprawy w przeważającej mierze zostały opublikowane w czasopismach fizycznych najwyższej rangi (trzy artykuły w *Physical Review Letters*, jeden w *Physical Review X*, cztery w *Physical Review B*), we wszystkich przypadkach dr Wojciech Brzezicki jest pierwszym autorem, a jego wkład pracy wynosił od 60 do 80%. Łączna liczba cytowań prac stanowiących rozprawę wynosi 119, przy całkowitej liczbie cytowań habilitanta równej 315 (lub 229 po odjęciu autocytowań). Widać zatem, że rozprawa jest starannie wybranym, na podstawie kryterium tematycznego, fragmentem dorobku naukowego habilitanta, na który składa się łącznie 30 artykułów naukowych (w tym 21 opublikowanych po uzyskaniu w czerwcu 2012 roku stopnia naukowego doktora). Rozprawę uzupełnia obszerny (34 strony) Autoreferat, w którym szczegółowo przedstawiono zasadnicze problemy badawcze i główne wyniki naukowe rozprawy, a także krótka charakterystyka innych osiągnięć naukowych habilitanta.

Wiodącym tematem prac stanowiących recenzowaną rozprawę jest istnienie i stabilność różnych rodzajów faz uporządkowanych w układach tlenków metali przejściowych o strukturze perowskitowej. Charakter uporządkowania zdeterminowany jest przez takie parametry jak energia oddziaływania kulombowskiego (typu Hubbarda), wyraz Hunda, czy sprzężenie spin-orbita. Mnogość istotnych parametrów fizycznych w połączeniu z obecnością spinowych, orbitalnych

i ładunkowych stopni swobody prowadzi do bogactwa faz uporządkowanych, których stabilność jest nieoczywista w sytuacji, gdy energia kinetyczna konkuruje z energiami poszczególnych oddziaływań. Pojawiające się wówczas fluktuacje kwantowe są dodatkowo wzmocnione w sytuacji obniżonej wymiarowości układu; dlatego znaczna część rozprawy poświęcona jest układom jedno- i dwuwymiarowym. Z drugiej strony, charakter fazy uporządkowanej może mieć istotne konsekwencje z punktu widzenia szeroko rozważanych praktycznych zastosowań materiałów perowskitowych, które obejmują obszary od fotowoltaniki do problemu fizycznej realizacji kubitów dla potrzeb komputerów kwantowych (ta ostatnia możliwość związana jest w szczególności z obecnością topologicznie chronionych stanów brzegowych w rozważanych w rozprawie układach niskowymiarowych).

Omówię teraz krótko najważniejsze wyniki prac stanowiących rozprawę.

Dwie pierwsze prace [*Noncollinear magnetic order stabilized by entangled spin-orbital fluctuations,* Phys. Rev. Lett. **109**, 237201 (2012); *Exotic spin orders driven by orbital fluctuations in the Kugel-Khomskii model*, Phys. Rev. B **87**, 064407 (2013)] poświęcono opisowi faz spinowo-orbitalnych w ramach modelu Kugela-Khomskiego, odpowiednio w dwóch i trzech wymiarach, który fizycznie realizowany jest w układach miedziowo-fluorowych (K_2CuF_4 i $KCuF_3$). Pokazano, że fluktuacje spinowo-orbitalne (a ściślej: splątanie kwantowe pomiędzy spinowymi i orbitalnymi stopniami swobody) mogą prowadzić, dla odpowiednio dobranych parametrów modelowych, do istnienia stabilnych faz z niekolinearnym porządkiem magnetycznym. Opisany mechanizm nie był znany wcześniej, za ciekawy należy uznać fakt, że niekolinearny porządek magnetyczny pojawia się w układzie stosunkowo lekkiego metalu przejściowego, dla którego efekty relatywistyczne (w tym sprzężenie spin-orbita) zostały zaniedbane.

Kolejne dwie prace [*Topological Order in an Entangled SU(2)⊗XY Spin-Orbital Ring*, Phys. Rev. Lett. **112**, 117204 (2014); *Second-order Peierls transition in the spin-orbital Kumar-Heisenberg model*, Phys. Rev. B **91**, 205137 (2015)] dotyczą jednowymiarowego układu ze spinami i pseudospinami orbitalnymi S=T=1/2. W pierwszym przypadku, układ opisany jest modelem SU(2)⊗XY zaproponowanym niedawno przez Kumara (w którym nie występują oddziaływania spinów, a jedynie oddziaływania par spin-orbital na sąsiednich węzłach), po wprowadzeniu periodycznych warunków brzegowych. Okazuje się, że taka modyfikacja prowadzi do pojawienia się porządku topologicznego w układzie silnie skorelowanym, który daje się rozwiązać w sposób ścisły. W drugim przypadku, do modelu SU(2)⊗XY dodano wyraz typu Heisenberga, opisujący oddziaływania pomiędzy spinami. Analiza numeryczna pokazała, że fluktuacje spinowo-orbitalne prowadzą wówczas do efektu analogicznego do dimeryzacji typu Peierlsa znanej z układów ze sprzężeniem elektron-fonon.

Trzy dalsze prace [*Spin-Orbital Order Modified by Orbital Dilution in Transition-Metal Oxides: From Spin Defects to Frustrated Spins Polarizing Host Orbitals*, Phys. Rev. X **5**, 011037 (2015); *Novel Spin-Orbital Phases Induced by Orbital Dilution*, J. Supercond. Nov. Magn. **29**, 563 (2016); *Exotic Spin-Orbital Physics in Hybrid Oxides*, ibid. **30**, 129 (2017)] koncentrują się na fizyce układów niejednorodnych, jak np. warstwowe tlenki rutenu (konfiguracja elektronowa: $4d^4$), w których część atomów rutenu zastąpiono manganem (o konfiguracji $3d^3$). Główne wyniki, od strony formalnej, stanowią wyprowadzenia nieznanych wcześniej hamiltonianów efektywnych dla niskoenergtyczych wzbudzeń spinowo-orbitalnych. Od strony fizycznej, autorzy wykazali z kolei, że domieszki czysto magnetyczne mogą wpływać zarówno na porządek magnetyczny jak i orbitalny w rozważanych układach. Okazuje się także, że chociaż domieszkowanie generalnie zwiększa lokalne fluktuacje kwantowe w sektorze orbitalnym, wpływ tego faktu na globalny porządek orbitalny zależy wyjściowego stanu układu niedomieszkowanego, na który wpływ ma między innymi wartość sprzężenia spin-orbita.

W następnej pracy [*Zigzag and Checkerboard Magnetic Patterns in Orbitally Directional Double-Exchange Systems*, Phys. Rev. Lett. **114**, 247002 (2015)] ponownie rozważany jest niejednorodny układ warstwowy: tlenek rutenu domieszkowany manganem, tym razem jednak w hamiltonianie modelowym wprowadzono dodatkowo ładunkowe stopnie swobody, zakładając, że jedynie część nośników ulega lokalizacji i poprzez oddziaływanie spinowe wpływa na dynamikę elektronów niezlokalizowanych. Przeprowadzone badania numeryczne pozwoliły w szczególności wykazać stabilność szeregu faz magnetycznych z uporządkowaniem typu zygzakowego, podobnych do obserwowanych w eksperymentach.

Opisane wyżej wyniki stanowiły punkt wyjścia dla pracy *Topological Gapless Phases in Non-Symmorphic Antiferromagnets* [Phys. Rev. B **95**, 155108 (2017)], w której pokazano, że dla odpowiednio dobranych wartości oddziaływania typu Hunda i sprzężenia spin-orbita, faza magnetyczna z uporządkowaniem zygzakowym współistnieje z topologicznie chronionym półmetalem (z punktami Diraca obecnymi w relacji dyspersji). Mechanizm ochrony topologicznej półmetalu związany jest z istnieniem symetrii niesymorficznej układu, a dokładniej symetrii względem odbicia lustrzanego z jednoczesnym przesunięciem o wektor będący połową (a zatem — niecałkowitą wielokrotnością) jednego z wektorów bazowych sieci. Analogiczne mechanizmy są dobrze znane dla układów o standardowych symetriach; stwierdzenie współistnienia porządku magnetycznego o symetrii niesymorficznej i fazy półmetalu Diraca jest ważnym wynikiem, ponieważ obecnie brak kompletnej klasyfikacji niezmienników topologicznych dla układów bezprzerwowych o symetriach niesymorficznych. Uzasadnione wydaje się przypuszczenie, że fazy półmetalu Diraca

najprawdopodobniej będą pojawiać się także w innych układach o niesymorficznym porządku magnetycznym.

Dwie ostatnie prace [*Driving topological phases by spatially inhomogeneous pairing centers*, Phys. Rev. B **95**, 140506 (2017); *Topological Phases Emerging from Spin-Orbital Physics*, J. Supercond. Nov. Magn. **31**, 639 (2018)] dotyczą różnych modeli jednowymiarowego łańcucha spinowo-orbitalnego z tzw. rozrzedzeniem ładunkowym, którego realizacją może być układ d^4 z domieszkami d^2. W pierwszym kroku, układ taki opisano przybliżonym modelem Kitaeva (otrzymanym w drodze mapowania układu spinowo-orbitalnego na układ bezspinowych fermionów), w którym domieszki modelowane są jako centra z parowaniem nadprzewodzącym. Takie przybliżenie umożliwiło w szczególności znalezienie zwięzłych wyrażeń analitycznych, wiążących ładunek topologiczny z parametrami mikroskopowymi. Dalsze wyniki wskazują na istnienie topologicznie chronionych stanów Majorany na brzegach układu otwartego, jak również lokalnych symetrii (typu Lorentza) ze względu na przeskalowanie parametrów każdej z domieszek z osobna. W ostatniej pracy dyskutowano pełny model spinowo-orbitalny, w którym orbitalne i spinowe stopnie swobody mogą wykazywać splątanie kwantowe. Chociaż rozmiar przestrzeni Hilberta wymusił ogranicznie rachunków do układu siedmiu węzłów i jednej domieszki, udało się znaleźć zakres parametrów modelu, w którym możliwa jest identyfikacja orbitalnych stanów typu Majorany na brzegach układu, co stanowi potwierdzenie prawdopodobnie najistotniejszego z wyników otrzymanych wcześniej w podejściu opartym na niejednorodnym modelu Kitaeva.

Przystępując do oceny przedłożonej rozprawy należy podkreślić, że Autoreferat i wszystkie materiały uzupełniające zostały przygotowane z dużą starannością, a prace wchodzące z skład rozprawy bez wyjątku prezentują głęboką dyskusję fizyczną rozważanych problemów w ramach wybranych przybliżeń. Pewien niedosyt budzą stosunkowo nieliczne wzmianki (w Autoreferacie) dotyczące aktualnego stanu badań doświadczalnych rozważanych układów: pierwsze jawne odniesienie do eksperymentu pojawia się na stronie 16. i dotyczy fazy magnetycznej z porządkiem zygzakowym, kolejne na stronie 25. dotyczy stanów brzegowych Majorany. Wydaje się, że w tak obszernym tekście dotyczącym dynamicznie rozwijającego się obszaru badań w fizyce materii skondensowanej takich odniesień powinno być więcej. Kilka spośród użytych terminów zostało dobranych dość niefortunnie, dla przykładu przytoczę "jednowymiarowy nadprzewodnik" (jak nazwano łańcuch opisany modelem Kitaeva) podczas gdy należałoby raczej mówić układzie z parowaniem nadprzewodzącym w przestrzeni rzeczywistej. Razi także sformułowanie "zaobserwowane stany Majorany" (strona 26.) w paragrafie opisującym przewidywania teoretyczne habilitanta. Drobne nieścisłości językowe nie przekreślają jednak znacznego wkładu

pracy i wspomnianego wyżej wrażenia dużej staranności w przygotowaniu Autoreferatu i pozostałych materiałów uzupełniających.

Bez wątpienia, szereg wyników teoretycznych przedstawionych w rozprawie ma spore znaczenie dla rozwoju badań układów silnie skorelowanych i zostało już zauważonych przez licznych badaczy zajmujących się tą tematyką w Kraju i na świecie, spełnione są zatem ustawowe kryteria wymagane do nadania stopnia doktora habilitowanego. W moim przekonaniu, szczególne istotne są następujące spośród wyników otrzymanych przez habilitanta:

- identyfikacja stabilnych faz magnetycznych z uporządkowaniem niekolinearnym w układach bez efektów relatywistycznych, gdzie czynnikiem stabilizującym jest splątanie kwantowe spinowych i orbitalnych stopni swobody;

- sformułowanie efektywnych modeli spinowo-orbitalnych dla domieszkowanych tlenków rutenu oraz wskazanie, że domieszki czysto magnetyczne (spinowe) mogą indukować zarówno uporządkowanie magnetyczne jak i orbitalne;

- rozszerzenie obecnie niepełnej klasyfikacji faz topologicznych w układach z silnymi korelacjami o przypadek układu z porządkiem magnetycznym o symetrii niesymorficznej, który współistnieje z półmetalem dirakowskim.

Na uwagę zasługuje także fakt, że habilitant — dość nieoczekiwanie — znalazł nieznane wcześniej rozwiązania analityczne kilku rozważanych modeli jednowymiarowych (model spinowo-orbitalny z porządkiem topologicznym i niejednorodny model Kitaeva z parowaniem nadprzewodzącym), których własności pozwalają przypuszczać, że występujące w nich fazy o nietrywialnym porządku topologicznym będą pojawiać się także w bardziej realistycznych układach (a dalsze badania numeryczne habilitanta uprawdopodobniły to przypuszczenie). Warto podkreślić, że w pracach wchodzących w zakres rozprawy zaimplementowano szeroką gamę metod obliczeniowych współczesnej fizyki materii skondensowanej, od różnych rodzajów teorii pola średniego uzupełnianych kanonicznym rachunkiem zaburzeń, poprzez ścisłą diagonalizację małych klastrów, aż po specyficzne techniki dla układów jednowymiarowych, jak tzw. grupa renormalizacji macierzy gęstości (ang. *density matrix renormalization group*). Tak szerokie i różnorodne doświadczenie badawcze bez wątpienia stanowi istotną przesłankę świadczącą o zdolności habilitanta do kierowania własnym zespołem naukowym w niedalekiej przyszłości.

W podsumowaniu, jestem przekonany, że przedstawione mi do oceny osiągnięcie naukowe w formie monotematyczny zbióru artykułów spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom habilitacyjnym, wnioskuję zatem o przyznanie dr. Wojciechowi Brzezickiemu stopnia naukowego doktora

habilitowanego. Uważam także, że zarówno proste kryteria ilościowe (wysoka ranga czasopism naukowych i znaczna liczba cytowań prac stanowiących rozprawę) jak również charakter i potencjalne znaczenie wielu spośród przedstawionych wyników wskazują, że mamy do czynienia z rozprawą zdecydowanie ponadprzeciętną, i wnioskuję o jej wyróżnienie.

Adam Rycerz