



Wrocław, 22.05.2022

Prof. dr hab. Maciej Maśka
Katedra Fizyki Teoretycznej
Wydział Podstawowych Problemów Fizyki
Politechnika Wroclawska

Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr. inż. Jakuba Krawczyka p.t.:

***Własności termodynamiczne i transportowe
modelu Falicova-Kimballa wyznaczone metodą
dynamicznego pola średniego***

Recenzowana rozprawa doktorska poświęcona jest zbadaniu pewnych szczególnych własności modelu Falicova-Kimballa (FK), także rozszerzonego, w którym uwzględnione zostało dodatkowe oddziaływania. Podstawową metodą obliczeniową używaną w pracy jest przybliżenie dynamicznego pola średniego, a więc metoda dająca dokładne wyniki w przypadku nieskończonego wymiaru badanego układu. W niektórych przypadkach stosowane jest także „tradycyjne” przybliżenie średniego pola.

Rozprawa napisana jest w języku polskim, składa się na nią sześć rozdziałów wliczając w to wstęp oraz podsumowanie i wnioski. Główne części pracy to opis metody dynamicznego pola średniego, termodynamika modelu FK dla małych wartości oddziaływania kulombowskiego U , termodynamika rozszerzonego modelu FK oraz własności transportowe modelu FK. Zasadnicza część pracy ma 66 stron; całość kończy bibliografia zawierająca 85 pozycji.

Recenzję rozpocznę od krótkiego przeglądu zawartości pracy. Wstęp rozpoczyna się dwustronicowym omówieniem układów z silnie skorelowanymi



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wroclawska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

budynek A-1, pok. 234

Tel: +48 71 320 25 79,
+48 71 320-23-95

dziekan.wppt@pwr.edu.pl
http://wppt.pwr.edu.pl

REGON: 000001614
NIP: 896-000-58-51
Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



elektronami, modelu Hubbarda i przykładowych zjawisk w tych układach występujących. Następnie wprowadzona jest uogólniona postać modelu FK i omówiona jego interpretacja fizyczna. Na końcu wstępu doktorant przedstawił cel rozprawy oraz omówił zawartość poszczególnych rozdziałów.

Rozdział drugi poświęcony jest teorii dynamicznego pola średniego. Rozpoczyna się on podręcznikowym przedstawieniem „tradycyjnego” przybliżenia pola średniego na przykładzie modelu Isinga. Następnie omówiony jest sposób przejścia do układów nieskończenie wymiarowych, w szczególności sposób skalowania parametrów modelu tak, aby w granicy $D \rightarrow \infty$ energia kinetyczna nie była rozbieżna. Dalej wprowadzone są funkcje Greena i odpowiadające im funkcje spektralne. Kolejne podrozdziały przedstawiają skrótowo teorię dynamicznego pola średniego oraz wyrażenia na funkcje Greena i energię własną dla modelu FK w tym podejściu.

Rozdział trzeci rozpoczyna prezentację oryginalnych wyników doktoranta. Dotyczy on analizy własności modelu FK dla słabego oddziaływania kulombowskiego. Motywacją było znane nietypowe zachowanie modelu FK w tej granicy, polegające na zależności parametru porządku (zdefiniowanego jako różnica obsadzeń dwóch podsieci) od temperatury mocno odbiegającej od rozwiązań znanych z przybliżenia średniego pola np. dla modelu Isinga albo teorii BCS. Model FK był na sieci Bethego, a prócz parametru porządku badana była także temperaturowa zależność ciepła właściwego. Podawane są tam wzory na funkcje Greena dla obu podsieci (z rozwiązaniami dla zerowej i wysokiej temperatury), gęstość stanów oraz opisana samozgodna procedura wyznaczania parametru porządku i innych wielkości termodynamicznych. W szczególności obliczana jest zależność gęstości stanów od parametru porządku. Obliczenia prowadzone są dla słabego oddziaływania z U z przedziału od 0.0001 do 0.3 oraz $U = \sqrt{2}$. Ten ostatni przypadek nie mieści się w zakresie małego U , ale został zbadany ze względu na inny nietypowy efekt, który omówiony jest w dalszej części



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wroclawska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

budynek A-1, pok. 234

Tel: +48 71 320 25 79,
+48 71 320-23-95

dziekan.wppt@pwr.edu.pl
<http://wppt.pwr.edu.pl>

REGON: 000001614
NIP: 896-000-58-51
Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



pracy. Na wykresach od 3.2 do 3.7 pokazane są gęstości stanów dla różnych wartości U oraz różnych wartości parametru porządku. Niektóre z tych wartości są bardzo precyzyjnie „dostrajane”, na przykład rysunek 3.7 pokazuje gęstość stanów dla sześciu różnych wartości parametru porządku od 0.99994 do 1. Nie jestem do końca przekonany jaka jest wartość takich wykresów. Chodzi o to, że parametr porządku nie jest parametrem wejściowym (zadawanym z zewnątrz), a powinien być wyliczany dla danej temperatury, co jest dyskutowane w podrozdziale 3.2. Dlatego bardziej naturalne byłoby podanie gęstości stanów dla danej temperatury, niż dla danej wartości parametru porządku. Innym problemem związanym z tymi wykresami jest niesamowita wrażliwość gęstości stanów na wartość parametru porządku. Rysunek 3.7 pokazuje że gęstość stanów znacząco zmienia się przy zmianach wartości parametru porządku rzędu 10^{-5} . Z jaką zmianą energii wiąże się tak mała zmiana wartości parametru porządku? Dokładniej, w jakiej relacji ta zmiana pozostaje w stosunku do $k_B T$, gdzie T jest temperaturą, w której dana wartość parametru porządku odpowiada minimum energii swobodnej? Chodzi o to, że jeśli to minimum energii swobodnej byłoby płaskie, czyli zmiany energii odpowiadające zmianie parametru porządku rzędu 10^{-5} byłyby mniejsze niż $k_B T$, to fluktuacje termiczne mogłyby bardzo silnie wpływać na gęstość stanów. Myślę, że warto by ten problem przedyskutować.

Jak już wspomniano wyżej, w podrozdziale 3.2 pokazano jak zależność parametru porządku od temperatury zmienia się przy zmianie U . W szczególności przez rozwiązanie modelu dla oddziaływania z przedziału od 0.0001 do 1, zilustrowane zostało przejście od nietypowego zachowania pokazanego przez Petera van Dongena dla $U \rightarrow 0$, w którym parametr gwałtownie spada do bardzo małych wartości w okolicach połowy temperatury krytycznej, do standardowej zależności znanej na przykład z teorii BCS. Ewolucja tej zależności jest w podrozdziale dość dokładnie opisana, otwartym natomiast pozostaje pytanie o źródło tego nietypowego zachowania oraz czy można z jakiś fizycznych przesłanek oszacować wartość krytyczną oddziaływania, powyżej której znika to



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wroclawska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

budynek A-1, pok. 234

Tel: +48 71 320 25 79,
+48 71 320-23-95

dziekan.wppt@pwr.edu.pl
<http://wppt.pwr.edu.pl>

REGON: 000001614
NIP: 896-000-58-51
Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



zachowanie. Innym ciekawym efektem jest pojawianie się stanów wewnątrzprzerwowych.

Kolejną wielkością badaną dla modelu FK w obszarze słabego oddziaływania jest ciepło właściwe. Pokazano tam, że dla $U = 1$ ciepło właściwe posiada dwa maksima, z których jedno znajduje się w temperaturze krytycznej, a drugie, znacznie niższe i bardziej płaskie, w wysokiej temperaturze. Budzi się tu pytanie, czy zastosowanie wzoru (3.13), czyli wzoru otrzymanego w granicy $U \rightarrow \infty$, ma uzasadnienie w przypadku $U = 1$? Przy przechodzeniu w stronę słabszego oddziaływania to wysokotemperaturowe maksimum znika, natomiast niskotemperaturowa zależność ciepła właściwego zaczyna ewoluować w stronę nietypowego kształtu, bez maksimum w temperaturze krytycznej. Co ciekawe, w pewnym zakresie parametrów kształt temperaturowej zależności ciepła właściwego podobny jest do kształtu pochodnej parametru porządku po temperaturze.

W kolejnym rozdziale doktorant rozszerza model FK poprzez dodanie oddziaływania międzywęzłowego V . Obecność tego oddziaływania – pod warunkiem, że jest wystarczająco silne - powoduje, że w modelu nie pojawia się już ta nietypowa zależność temperaturowa parametru porządku. Żeby zbadać ten problem, prócz metody dynamicznego pola średniego stosowane jest także „tradycyjne” przybliżenie średniego pola [nie do końca jasne jest określenie „(...) przybliżenie H-F ze złamaną symetrią pola średniego”]. W szczególności chodzi o wyznaczenie, czy istnieje dolna granica tego oddziaływania, poniżej której nietypowy przebieg parametru porządku przy zmianie temperatury jest zachowany. Podobnie jak w poprzednim rozdziale, wyznaczana jest tu gęstość stanów (dla bardzo małej wartości oddziaływania międzywęzłowego), temperaturowa zależność parametru porządku czy ciepło właściwe. Głównym wynikiem tych analiz było pokazanie, że nawet stosunkowo słabe oddziaływanie międzywęzłowe może zapobiec nietypowemu przebiegowi parametru porządku w funkcji temperatury.



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wroclawska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

budynek A-1, pok. 234

Tel: +48 71 320 25 79,
+48 71 320-23-95

dziekian.wppt@pwr.edu.pl
<http://wppt.pwr.edu.pl>

REGON: 000001614
NIP: 896-000-58-51
Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Rozdział piąty poświęcony jest własnościom transportowym modelu FK. Rozdział ten wydaje się być najciekawszym w całej rozprawie, ponieważ dotyczy własności modelu FK, które wcześniej nie były znane. Chodzi o to, co dzieje się dla wspomnianej już wcześniej wartości oddziaływania $U = \sqrt{2}$. Niestety, równocześnie rozdział ten pozostawia najwięcej do życzenia. Przewodnictwo to bardzo skomplikowane zagadnienie, możemy mówić o przewodnictwie stałoprądowym, zmiennoprądowym, mamy teorię Boltzmann, mamy formalizm Kubo, możemy być w reżimie liniowej reakcji układu, możemy próbować wyjść poza nią, itp. Wydawałoby się, że te zagadnienia powinny poprzedzić jakiegokolwiek badania własności transportowych. Tymczasem cała analiza opiera się na jednym wzorze, który pochodzi z nieopublikowanej pracy. Rodzą się więc pytania, na które mam nadzieję doktorant odpowie w trakcie obrony. W szczególności, czy czas relaksacji występujący we wzorze (5.1) został wyprowadzony w referencji [75]? Jeśli tak, to ze względu na to, że praca nie jest dostępna, a doktorant jest jednym z jej autorów, byłoby wskazane, żeby wyprowadzenie to było zawarte w rozprawie. Kolejna sprawa do rysunek 5.1, zaczerpnięty z tej samej publikacji. Jest to bardzo ciekawy diagram fazowy modelu FK. Niestety, w tekście rozprawy nie znalazłem ani jednego odwołania do tego diagramu. Dlatego nie ma też żadnego wyjaśnienia definicji faz występujących na diagramie, informacji jak wyznaczone byłyby obszary przejściowe (*crossover region*), ani jakie przejścia występują pomiędzy różnymi fazami. Kolejna sprawa dotycząca tego diagramu, to różnica między nim, a diagramem zaprezentowanym przez Antipova w *Phys. Rev. Lett.* **117**, 146601 (2016). W pracy tej twierdzą, że we wcześniejszych pracach dotyczących modelu FK nie zauważono fazy izolatora Andersona. Czy w używanym przez doktoranta podejściu jest możliwe istnienie takiej fazy? Pomijając powyższe uwagi, rozdział ten zawiera ciekawe wyniki dotyczące temperaturowej zależności przewodności oraz jej skalowania w pobliżu $U = \sqrt{2}$. Warte zauważenia jest także to, że rozdział ten zawiera pewną dyskusję fizycznych mechanizmów odpowiedzialnych za to zachowanie.



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wroclawska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

budynek A-1, pok. 234
Tel: +48 71 320 25 79,
+48 71 320-23-95

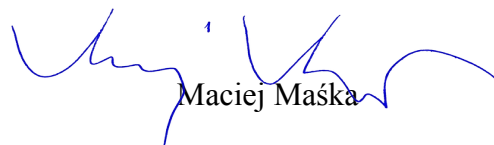
dziekan.wppt@pwr.edu.pl
<http://wppt.pwr.edu.pl>

REGON: 000001614
NIP: 896-000-58-51
Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Do rozprawy nie była dołączona lista publikacji doktoranta, ale bibliografia wskazuje, że jest on współautorem dwóch publikacji, jednej w *Acta Physica Polonica A* oraz jednej w *Condensed Matter Physics*, przy czym zgodnie z oświadczeniem doktoranta do habilitacji dr. K. Kapci, jego udział w tej drugiej pracy wynosił zaledwie 15%. Nie jest to dorobek imponujący, ale obowiązująca ustawa nie stawia tu żadnych wymagań.

Podsumowując stwierdzam, że zaprezentowane w rozprawie pana mgr. inż. Jakuba Krawczyka wyniki stanowią oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, tym samym rozprawa spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim w *Ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym*. Jednocześnie wnoszą o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Maciej Maśka



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Evaluated by
IEP INSTITUTIONAL
EVALUATION
PROGRAMME
www.iep-qaa.org

Politechnika Wroclawska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław
budynek A-1, pok. 234
Tel: +48 71 320 25 79,
+48 71 320-23-95

dziekan.wppt@pwr.edu.pl
<http://wppt.pwr.edu.pl>

REGON: 000001614
NIP: 896-000-58-51
Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434