

Prof. dr hab. Krzysztof Byczuk

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wydział Fizyki

Uniwersytet Warszawski

Pasteura 5

02-093 Warszawa

## Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr Jakuba Krawczyka

Rozprawa doktorska pana mgra Jakuba Krawczyka pod tytułem „Własności termodynamiczne i transportowe modelu Falicova-Kimballa wyznaczone metodą dynamicznego pola średniego” powstała w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu. Promotorem pracy jest prof. dr hab. Romuald Lemański. Rozprawa napisana jest w języku polskim, zawiera 73 strony podzielone na sześć rozdziałów oraz bibliografię. Tekst rozprawy opiera się na dwóch opublikowanych pracach naukowych, w których pan mgr Krawczyk jest współautorem oraz jednej pracy przygotowywanej do wysłania.

We Wstępie autor dokonuje krótkiego wprowadzenia do fizyki układów skorelowanych elektronów, wymieniając najistotniejsze cechy takich układów i zjawiska fizyczne w nich obserwowane. Zostaje też wprowadzony model Falicova-Kimballa, który będzie analizowanych w dalszych rozdziałach tej pracy. Wstęp kończy krótkie omówienie celu pracy oraz przedstawienie trzech zagadnień będących przedmiotem tej dysertacji.

Rozdział drugi poświęcony jest obszernemu wprowadzeniu do teorii dynamicznego pola średniego. Autor rozpoczyna dyskusję od przypomnienia idei pola średniego na przykładzie modelu Isinga, argumentując że to rozwiązanie jest ściśle w granicy nieskończonej liczby najbliższych sąsiadów. Następnie omawiana jest teoria dynamicznego pola średniego na przykładzie modelu Hubbarda, zostaje wprowadzony niezbędny formalizm teorii wielu ciał i na koniec przedstawione jest rozwiązanie modelu Falicova-Kimballa w tym przybliżeniu. Dla modelu Falicova-Kimballa autor robi też krótkie porównanie wyników otrzymanych w ramach różnych technik obliczeniowych.

Rozdział trzeci przedstawia termodynamikę modelu Falicova-Kimballa dla małych wartości parametru oddziaływania. Jest to jedno z trzech osiągnięć prezentowanych w ramach tej rozprawy doktorskiej. Swoją analizę autor rozpoczyna od szczegółowego opisu zachowania się gęstości stanów dla tego modelu. Obliczenia oparte są na analitycznych formułach dla funkcji Greena otrzymanych w ramach teorii dynamicznego pola średniego oraz zastosowaniu jej do tzw. sieci Bethego, tzn. grafu drzewiastego, w którym liczba koordynacyjna  $Z$  dąży do nieskończoności. Choć samo rozwiązanie znane jest w literaturze od lat, ostatnio zauważono, między innymi przez promotora pracy prof. Lemańskiego, że dla małych wartości oddziaływania pojawiają się dodatkowe stany spektralne w przerwie energetycznej. Mgr Krawczyk dokonał szczegółowej numerycznej analizy zachowania się

gęstości stanów w tym zakresie parametrów. Zasadnicze wyniki przedstawia seria rysunków 3.1-3.8, które są omawiane szczegółowo w tekście. Mam pewien problem w zrozumieniu niektórych szczegółów, np. na rys. 3.4 panel a i f oraz 3.6 dla  $d=1$  znajduje się ukośna linia, nie do końca wyglądająca na poprawne rozwiązanie modelu. Przydałoby się lepsze wyjaśnienie jak odczytać te wykresy. Zauważyłbym też, że gęstość stanów 3.4 otrzymana jest z 3.2 i 3.3 raczej poprzez procedurę przedłużenia analitycznego niż przez transformatę Laplace'a jak napisano. Dalej autor omawia anomalie w przebiegu temperatury dla parametru porządku w modelu Falicova-Kimballa. Dla małych wartości  $U$  parametr porządku zmienia swoją wypukłość jako funkcja temperatury. Dla silnych oddziaływań przebieg krzywej jest standardowy i przypomina funkcję Brillouina. Przejście pomiędzy tymi dwoma typami zachowania się parametru porządku na charakter ciągły i jest szczegółowo analizowany numerycznie przez mgra Krawczyka. Pod koniec rozdziału 3.2 autor wspomina o odstępstwach pomiędzy rozwiązaniami DMFT oraz w metodzie Monte Carlo. Wydaje mi się, że dla małych  $U$  wyniki powinny być porównywalne gdyż układ jest w reżimie perturbacyjnym. Jedyne różnice powinny pochodzić od gęstości stanów. Dalej w rozdz. 3.3 mgr Krawczyk analizuje ciepło właściwe i stara się powiązać jego zachowanie z anomalnym zachowaniem parametru porządku. Wyniki są zebrane w rysunkach 3.13-3.19 i szczegółowo omówione w tekście. Zastanawia mnie pochodzenie określenia przejście  $\lambda$  dla obecnego przypadku. W przypadku przejścia w helu ciepło właściwe przypominało rozbieżność logarytmiczna w temperaturze krytycznej i kształtem literę  $\lambda$ . Obecnie nie widzę takiego podobieństwa, a raczej mówimy o skoku ciepła właściwego np. rys. 3.13. Podsumowując tą część, rozprawa zawiera bardzo szczegółowe i ciekawe wyniki dla własności termodynamicznych modelu Falicova-Kimballa. Szkoda jednak, że nie udało się podać fizycznej interpretacji powodu pojawiania się dodatkowych stanów spektralnych w przerwie energetycznej oraz anomalnego zachowania się parametru porządku. Ponieważ obserwuje się to dla bardzo małych  $U \ll t$ , być może analiza perturbacyjna pozwoliłaby na zbudowanie intuicji fizycznej stojącej za tymi numerycznymi obserwacjami.

W rozdziale czwartym mgr Krawczyk bada wpływ oddziaływania pomiędzy elektronami na sąsiednich węzłach na anomalne zachowanie się parametru porządku i gęstości stanów w modelu Falicova-Kimballa. Tzw. rozszerzony model Falicova-Kimballa, uwzględniający poza lokalnym oddziaływaniem  $U$ , oddziaływanie  $V$  pomiędzy cząstkami na sąsiednich węzłach, oraz mający dodatkowo spinowe stopnie swobody, rozwiązano w ramach teorii dynamicznego pola średniego z dodatkiem przybliżenia Hartree-Focka dla wyrazu zawierającego  $V$ . Takie podejście pozostaje ściśle w granicy nieskończonej liczby koordynacyjnej. Analiza oparta jest na analitycznych wyrażeniach dla funkcji Greena, podobnie jak poprzednio, i dlatego wolna od wpływu numerycznych przybliżeń. Dyskusję rozpoczyna analiza gęstości stanów, które są przedstawione na wielopanelowym rysunku 4.1. Niestety rysunek ten jest dość nieczytelny. W kolejnych rysunkach 4.2-4.5 przedstawione są zależności przerwy energetycznej od wartości parametru porządku oraz temperatury. Na kolejnym rysunku widać zmiany stanów spektralnych w przerwie wraz ze zmianą  $V$ . Numeryczna analiza pokazuje, że już niewielkie oddziaływanie między sąsiednimi węzłami niszczy stany w przerwie. Podobne zachowanie widać też dla parametru porządku na rysunkach 4.7-4.9. W dalszej części autor poszukuje krytycznej wartości tego parametru. Numerycznie jest ona bardzo mała. Na koniec mgr Krawczyk przedstawia wyniki dla ciepła właściwego dla różnych wartości  $V$ . Chyba najważniejszą konkluzją jest to, że anomalne zachowania fizyczne, omawiane we wcześniejszym rozdziale może są eksperymentalnie nieobserwowalne gdyż w każdym układzie oddziaływanie na sąsiednich węzłach są niezerowe. O ile

to może być prawdą dla układów krystalicznych, to być może układy na sieciach optycznych mogą wciąż być tutaj obiecujące.

W rozdziale piątym mgr Krawczyk bada własności transportowe modelu Falicova-Kimballa. Punktem wyjścia jest diagram fazowy, zaprezentowany na rysunku 5.1, na którym widać kwantowy punkt krytyczny rozdzielający słaby i silny izolator CDW. Niestety diagram ten jest dość słabo omówiony, a odnośnik literaturowy jest do pracy w przygotowaniu. Nie jest więc jasne czy jest to autorski wynik mgra Krawczyka i w jakim zakresie. Analiza w rozprawie skupia się na otoczeniu tego punktu krytycznego i poszukiwaniu uniwersalnego zachowania się przewodności dc. Na rysunku 5.2 znajdujemy przykłady zachowania się czasu relaksacji dla różnych częstości i oddziaływania  $U$ . Rysunki 5.3-5.4 przedstawiają przebieg przewodności w funkcji temperatury, wokół punktu krytycznego. W rozdziale 5.3 zastosowana jest teoria skalowania i wyznaczono numerycznie indeks krytyczny dla tego problemu. Odkrycie tego prawa skalowania jest jednym z ważniejszych wyników tej pracy.

Praca napisana jest poprawnym językiem naukowym, jest czytelna, zwięzła z szeroką bibliografią. Przedstawia nowatorskie wyniki dla modelu Falicova-Kimballa i jego rozszerzenia. Wyniki te wzbogacają naszą wiedzę na temat układów silnie skorelowanych fermionów oraz na temat teorii dynamicznego pola średniego. Z niecierpliwością będę czekał na oficjalną wersję przygotowywanej pracy [75]. Jak zwykle z dłuższymi pracami, tak i ta zawiera pewne mankamenty stylistyczne, językowe czy natury typograficznej. Nie wydaje mi się konieczne ich wymienianie w tym miejscu gdyż nie wpływa to w żaden sposób na mój pozytywny odbiór i ocenę tej pracy.

Podsumowując, uważam, że wyniki przedstawione w tej rozprawie są oryginalne i interesujące i spełniają formalne i zwyczajowe kryteria aby ich autor mógł otrzymać tytuł doktora nauk ścisłych w dyscyplinie nauki fizyczne. Dlatego wnoszę o dopuszczenie pana mgra Jakuba Krawczyka do dalszych etapów i publicznej obrony pracy doktorskiej.

Krzysztof Byczuk

