

Osiągnięcie habilitacyjne

Fazy i przemiany fazowe w równowagowych i nierównowagowych układach skorelowanych fermionów

Marcin Mateusz Wysokiński

Autoreferat

Spis treści

1	Imię i nazwisko	2
2	Posiadane dyplomy, stopnie naukowe	2
3	Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych	2
4	Omówienie osiągnięć, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy	3
4.1	Tytuł osiągnięcia naukowego	3
4.2	Publikacje naukowe będące podstawą osiągnięcia naukowego	3
4.3	Opis osiągnięcia naukowego	4
4.3.1	Wprowadzenie	4
4.3.2	Modele skorelowanych fermionów	6
4.3.3	Wielociałowe metody numeryczne i związane z nimi przybliżenia	8
4.3.4	Szczegółowy opis wyników zawartych w pracach [p1-p7]	12
4.3.5	Podsumowanie	29
4.3.6	Bibliografia	29
5	Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej	34
6	Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę	35
6.1	Dydaktyka	35
6.2	Organizacja konferencji	35
6.3	Popularyzacja nauki	35
7	Inne informacje dotyczące kariery zawodowej wnioskodawcy	36
7.1	Krótki opis prac opublikowanych po doktoracie nie będących częścią osiągnięcia naukowego	36
7.2	Nagrody, stypendia i granty naukowe	37
7.3	Wystąpienia konferencyjne i seminaryjne	37

1 Imię i nazwisko

Marcin Mateusz Wysokiński

2 Posiadane dyplomy, stopnie naukowe

- **Doktor nauk fizycznych** - Październik 2015, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Tytuł pracy: *Unconventional superconductivity and hybridized correlated fermion systems*,
Promotor: prof. dr hab. Józef Spałek,
Promotor pomocniczy: dr Jan Kaczmarczyk
Praca została obroniona z wyróżnieniem
- **Magister nauk fizycznych** - Czerwiec 2011, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Tytuł pracy: *Właściwości ciekłego Helu 3 jako skorelowanej cieczy kwantowej*,
Promotor: prof. dr hab. Józef Spałek
Praca została obroniona z wyróżnieniem

3 Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

Po ukończeniu studiów doktoranckich realizowałem badania jako:

- 11/2017 - obecnie: Adiunkt w grupie prof. T. Dietla, Międzynarodowe Centrum Badawcze MagTop, Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, Warszawa
- 11/2015 - 10/2017: Kierownik projektu *Mobilność Plus* w grupie prof. M. Fabrizio, International School for Advanced Studies (SISSA), Triest, Włochy
- 1 - 31/10/2015: Wykonawca grantu *Maestro* w grupie prof. J. Spałka, Uniwersytet Jagielloński, Kraków

4 Omówienie osiągnięć, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy

4.1 Tytuł osiągnięcia naukowego

Fazy i przemiany fazowe w równowagowych i nierównowagowych układach skorelowanych fermionów

4.2 Publikacje naukowe będące podstawą osiągnięcia naukowego

[p1] M. M. Wysokiński

Scientific Reports **9**, 19461 (2019)

Mechanism for transitions between ferromagnetic and antiferromagnetic orders in d-electron metallic magnets

[p2] G. Cuono, C. Autieri, M. M. Wysokiński

Physical Review B **104**, 024428 (2021),

Spatially modulated orbital-selective ferromagnetism in $La_5Co_2Ge_3$

[p3] M. M. Wysokiński

Physical Review B: Rapid Communication **97**, 041107 (2018),

Microscopic mechanism for the unusual antiferromagnetic order and the pressure-induced transition to ferromagnetism in USb_2

[p4] M. M. Wysokiński, M. Fabrizio

Physical Review B: Rapid Communication **94**, 121102 (2016),

Many-body breakdown of indirect gap in topological Kondo insulators

[p5] M. M. Wysokiński, M. Fabrizio

Physical Review B: Rapid Communication **95**, 161106 (2017),

Mott physics beyond the Brinkman-Rice scenario

[p6] M. M. Wysokiński, M. Fabrizio

Physical Review B: Rapid Communication **96**, 201115 (2017),

Interplay of charge and spin dynamics after an interaction quench in the Hubbard model

[p7] M. Płodzień, M. M. Wysokiński

Physical Review B: Rapid Communication **100**, 041116 (2019),

Rabi-resonant behavior of periodically-driven correlated fermion systems

4.3 Opis osiągnięcia naukowego

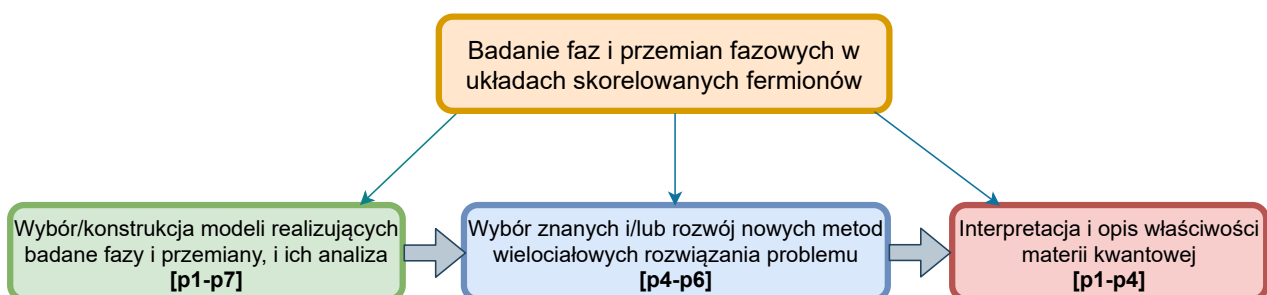
4.3.1 Wprowadzenie

Emergentne zachowania skorelowanych fermionów prowadzące do pojawienia się różnych złożonych faz np. magnetyzmu czy nadprzewodnictwa, są od dekad w centrum zainteresowania fizyków, zarówno eksperymentatorów jak i teoretyków. Pomimo coraz bardziej precyzyjnego badania materiałów w ekstremalnych warunkach niskich temperatur, wysokich ciśnień, kontrolowanego domieszkowania oraz wzbudzania do stanów dalekich od równowagi, kompletne teoretyczne zrozumienie mikroskopowych mechanizmów rządzących powstawaniem faz ciągle jest co najmniej niepełne. Trudności rozpoczynają się już na etapie definicji fazy. Wiele przemian fazowych udaje się opisać w języku ugruntowanej teorii Landau'a i takich pojęć jak spontaniczne łamanie symetrii i parametr porządku. Jednakże, ostatnio stało się jasne, że istotne jest rozszerzenie aparatu analizy przemian fazowych o zagadnienia porządku topologicznego [1] i zjawisk nierównowagowych [2].

Przemiany fazowe zachodzące w układach bliskich stanu równowagi podlegają pewnym uniwersalnym prawom w otoczeniu specjalnych punktów na diagramie fazowym. Sytuacja zmienia się diametralnie, gdy badamy układy w warunkach nierównowagowych. Szczególnie trudna jest wtedy analiza układów silnie oddziałujących. Dodatkowe zagadnienia pojawiają się gdy badane są oddziałujące układy z porządkiem topologicznym. Dlatego badania zjawisk emergentnych w materii kwantowej, takich jak powstawanie faz, i charakterystyka przemian między nimi, wymaga często specjalnych modeli i adekwatnych metod ich analizy. Z tych powodów w badaniach stanowiących podstawę osiągnięcia naukowego *Fazy i przemiany fazowe w równowagowych i nierównowagowych układach skorelowanych fermionów* proponuję teoretyczny wgląd w naturę wybranych faz (również topologicznych) i przejść fazowych (również dynamicznych) obserwowanych eksperymentalnie lub też realizowanych za pomocą uproszczonych modeli wielociałowych w układach skorelowanych fermionów w równowadze jak i poza równowagą.

Zgodnie z logiką zwykle następujących po sobie etapów badawczych, obszary zagadnień w ramach niniejszego osiągnięcia naukowego można podzielić na trzy grupy przedstawione na Rys. 1. Z naturalnych przyczyn zrealizowanie niektórych elementów z wymienionych na Rys. 1 etapów (np. wybór/konstrukcja modelu) jest niejako automatycznie znane z literatury przedmiotu w niektórych pracach (np. wybór modelu Hubbarda do badań nad fizyką Motta w [p5-p7]), a w innych jest kluczowym osiągnięciem (np. zaproponowanie modelu $d-p$ do opisu wędrownego ferromagnetyzmu w związkach chemicznych w [p1]). Z drugiej strony bardziej przejrzysty obraz mojego osiągnięcia naukowego można otrzymać podążając za motywacją zrealizowanych badań w pracach [p1-p7].

Badania w pracach [p1-p3] były motywowane bieżącymi eksperymentami sugerującymi przemiany fazowe indukowane zmianą ciśnienia między fazami ferromagnetyczną (FM) i antyferromagnetyczną (AFM) (lub ogólnie fazą magnetyczną modulowaną przestrzennie) w LaCrGe_3 [3], USb_2 [4] i $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ [5], a ich celem było zaproponowanie wyjaśnienia obserwowanych zjawisk. W realizacji tego celu kluczowe okazało się określenie minimalnego zestawu elementów charakteryzujących zacho-



Rysunek 1: Schematyczny podział następujących po sobie etapów badawczych dotyczących moich badań nad fazami i przemianami fazowymi w układach skorelowanych fermionów stanowiących prezentowane osiągnięcie naukowe.

wanie skorelowanych elektronów na powłokach d lub f we wspomnianych związkach chemicznych jak również udowodnienie, iż skonstruowane na tej bazie modele prowadzą do konsystentnej interpretacji wyników eksperymentalnych.

Kolejno, częściową motywacją badań podjętych w pracach [p4-p6] był rozwój nowych, wydajnych numerycznie metod wielociałowych, które pozwalają na opis różnych faz i przemian fazowych w modelach skorelowanych fermionów. Najdokładniejsze wielociałowe metody opisu skorelowanych fermionów zwykle wymagają ogromnych zasobów mocy obliczeniowej pozwalających na uchwycenie właściwości tylko najprostszych układów [6]. Problem tym bardziej się komplikuje w przypadku dynamicznych zjawisk gdzie metody numerycznie dostępne w równowagowych warunkach pozwalają na bardzo krótkie czasy symulacji nierównowagowych układów skorelowanych fermionów (np. metoda dynamicznego pola średniego [7]). Z tych powodów bardzo ważny jest rozwój alternatywnych narzędzi opisu, które pozwalają na numerycznie efektywną analizę właściwości wielociałowych modeli z dokładnością zbliżoną do uznanych rygorystycznych metod.

Ostatecznie, badania w pracach [p4-p7] były umotywowane wyzwaniem zrozumienia unikalnych właściwości wybranych skorelowanych układów fermionowych w warunkach zarówno równowagowych jak i nierównowagowych, które można przypisać określonym cechom wielociałowych oddziaływań. W tej perspektywie w pracy [p4] skupiłem się na zjawiskach związanych z nielokalnymi efektami korelacyjnymi¹. Z drugiej strony w pracach [p5-p7] moje badania skupiły się na zrozumieniu zachowania wysokoenergetycznych fluktuacji kwantowych² (prowadzących do wymiennego oddziaływania spinowego [8]) w związku z fizyką Motta zarówno w sytuacji równowagowej jak i nierównowagowej.

Niniejszy opis osiągnięcia naukowego jest zorganizowany w następujący sposób. W rozdziale 4.3.2 zostały omówione minimalne wielociałowe modele wykorzystane w pracach [p1, p3-p7] do opisu poszczególnych faz i przejść fazowych w układach skorelowanych fermionów. W rozdziale 4.3.3 wprowadzono klasyfikację wielociałowych metod numerycznych w ramach jednocząstkowej funkcji Greena. Klasyfikacja ta jest użyteczna do opisu metod opracowanych, uogólnionych lub stosowanych w pracach [p1, p3-p7]. W rozdziale 4.3.4 został przedstawiony szczegółowy opis wyników zawartych w każdej z prac [p1-p7] oddzielnie. Opis osiągnięcia kończy się podsumowaniem w rozdziale 4.3.5.

¹Nielokalne efekty korelacji manifestują się jako zależność energii własnej od pędu w jednocząstkowej funkcji Greena - zob. Sekcja 4.3.3

²Ich efekt zawarty jest w pełnej zależności energii własnej od częstotliwości w jednocząstkowej funkcji Greena - zob. Sekcja 4.3.3

4.3.2 Modele skorelowanych fermionów

Ważny przykład układów skorelowanych fermionów na sieci oferują związki chemiczne z elektronami na częściowo zapełnionych powłokach d lub f . Zlokalizowana natura obu tych orbitali powoduje, iż wiodącym efektem odpychania kulombowskiego pomiędzy elektronami jest silne n węzłowe oddziaływanie, zwane oddziaływaniem Hubbarda. W Hamiltonianie opisującym układ w języku drugiej kwantyzacji oddziaływanie to uwzględnione jest przez

$$H_{int} = U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}\uparrow\alpha} n_{\mathbf{i}\downarrow\alpha}, \quad (1)$$

gdzie $n_{\mathbf{i}\sigma\alpha}$ jest operatorem liczby elektronów o spinie $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ na orbitalu α w \mathbf{i} -tym węzle sieci krystalicznej, a U parametryzuje potencjał oddziaływania.

Obecność silnego oddziaływania tego typu jest wyzwaniem dla teoretycznego opisu. Dzieje się tak ponieważ, popularne i skuteczne metody teorii funkcjonału gęstości (density functional theory - DFT) pozwalające na uchwycenie skomplikowanej struktury krystalicznej i orbitalnej związków chemicznych, nie najlepiej radzą sobie z uwzględnieniem efektów silnego oddziaływania. Nawet połączenie podejścia DFT z wielociałowymi metodami uwzględniającymi złożone efekty oddziaływań (takich jak np. spinowe oddziaływanie wymienne), często angażujące ogromne zasoby obliczeniowe, cierpią na niesławny, ciągle nierozwiązany problem podwójnego uwzględnienia korelacji międzyelektronowych [9]. Jednocześnie należy zaznaczyć, że pomimo pewnych problemów metody DFT dają bardzo istotny wkład w zrozumienie właściwości skorelowanych układów jak to np. pokazaliśmy w pracy [p2].

Z tych powodów często, aby dobrze zrozumieć właściwości materiałów d lub f elektronowych, ważnym podejściem jest analiza minimalnych wielociałowych modeli z oddziaływaniem Hubbarda uwzględniających najważniejsze aspekty danego układu. Ograniczenie liczby stopni swobody w danym zagadnieniu pozwala na stosunkowo dokładną i transparentną teoretyczną analizę mechanizmów prowadzących do danych zachowań. Najprostszym modelem, opisującym odpychające się d elektrony poruszające się w sieci krystalicznej, jest jedno-orbitalny model Hubbarda:

$$H_{HM} = H_T + H_{int} = \sum_{\mathbf{ij}\sigma} t_{\mathbf{ij}} c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j}\sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}\uparrow} n_{\mathbf{i}\downarrow}, \quad (2)$$

gdzie operatory $c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger$ i $c_{\mathbf{i}\sigma}$, odpowiednio, kreują i anihilują elektron o spinie σ na \mathbf{i} -tym węzle (stąd $n_{\mathbf{i}\sigma} \equiv c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{i}\sigma}$), a $t_{\mathbf{ij}}$ oznacza całkę przeskoku elektronów pomiędzy sąsiadującymi węzłami sieci. Model ten, choć posiada stosunkowo prostą strukturę, nie posiada ścisłego rozwiązania przy dowolnej wymiarowości sieci. Zostało jednakże opracowanych wiele przybliżonych (a nawet dokładnych w granicy nieskończonej liczby wymiarów [10]) numerycznych metod wielociałowych pozwalających na dość precyzyjne przewidywanie właściwości modelu Hubbarda [6] (zob. rozdział 4.3.3), w szczególności dotyczących realizowanego przezeń stanu izolatora Motta jak i emergentnych stanów o złamanej symetrii takich jak magnetyzm czy nadprzewodnictwo. W tym kontekście wypada nadmienić, iż diagram fazowy otrzymany z pomocą tego modelu pozwala na pół-ilościową interpretację obserwacji wszystkich wymienionych faz w dziurowo domieszkowanych wysokotemperaturowych nadprzewodników na bazie miedzi (np. [11]).

Eksperymenty z zimnymi fermionowymi gazami atomowymi spulapkowanymi w sieciach optycznych otworzyły zupełnie nową perspektywę badań układów skorelowanych fermionów. Wysoka kontrola nad mikroskopowymi parametrami, takimi jak np. oddziaływanie, otworzyła możliwość badania nierównowagowych właściwości układu w odpowiedzi na czasowo-zależne zmiany. W efekcie wiele badań ukierunkowanych jest na eksperymentalną realizację modulowanych w czasie fermionowych układów [12, 13], ale również na czysto teoretyczne, podstawowe rozważania [14, 15]. Jednym z kluczowych kierunków badań jest tak zwana inżynieria Floqueta gdy w odpowiedzi na periodyczną modulację mikroskopowych parametrów w czasie, układ skorelowanych fermionów na pewnej skali czasowej jest opisywany przez nowy, często egzotyczny, efektywnie czasowo-niezależny Hamiltonian

[16, 17]. Równie intensywnie rozwijanym kierunkiem badań jest analiza dynamiki układu po gwałtownej zmianie mikroskopowych parametrów w pewnej chwili czasu (*quantum quench*). W modelu Hubbarda po-*quench*'owa dynamika uwidoczniła spektakularne zjawisko dynamicznego przejścia Motta [14].

Właściwości skorelowanych fermionów opisywanych przez model Hubbarda był analizowane przeze mnie w pracach [p5-p7] w kontekście fizyki Motta. Mianowicie, w pracy [p5] zaproponowałem nową metodę do opisu przejścia metal - izolator Motta, którą następnie uogólniłem do domeny czasowej w [p6] gdzie pozwoliła na opis dynamicznego przejścia Mott'a. Natomiast w pracy [p7] analizowałem zachowanie izolatora Mott'a poddanego periodycznemu wzbudzeniu poprzez modulacje amplitudy oddziaływania.

Nieco bardziej skomplikowanym modelem najczęściej używanym do opisu pewnych właściwości materiałów *f*-elektronowych, jest dwu-orbitalny model sieci Andersona (Anderson lattice model - ALM):

$$\mathcal{H}_{ALM} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_f f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}\uparrow}^f n_{\mathbf{i}\downarrow}^f + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (V_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.}), \quad (3)$$

gdzie operatory *f* odnoszą się do zlokalizowanych stanów na orbitalu *f*, a operatory *c* do stanów pasmowych przeważnie z orbitali *s* lub *p*. Kluczową cechą układów *f* elektronowych, uchwyconą w powyższym modelu przez bezdyspersyjny poziom energii ϵ_f , jest typowa duża separacja przestrzenna pomiędzy atomami z powłoką *f* skutkująca brakiem bezpośredniej całki przeskoku. Elektrony *f* jednakże często się delokalizują poprzez hybrydyzację ($V_{\mathbf{k}}$) do pasma przewodnictwa pochodzącego od atomów ligandu ($\epsilon_{\mathbf{k}}$). Hamiltonian (3) jest minimalnym modelem opisu układów *f*-elektronowych pozwalającym na spójne wyjaśnienie powstania wielu ciekawych faz obserwowanych w tych materiałach, takich jak ciężko-fermionowa ciecz Fermiego [18], izolator Kondo [18, 19], nadprzewodnik ciężkofermionowy [20] czy trójkrytyczny ferromagnetyk [21–23]. W pracy [p3] analizowałem model typu sieci Andersona w kontekście przemiany fazowej między antyferromagnetyzmem a ferromagnetyzmem. Natomiast w pracy [p4] model sieci Andersona ze spinowo zależną hybrydyzacją był rozważany w kontekście topologicznych przejść fazowych i przejścia metal - topologiczny izolator Kondo. Pomimo, iż nominalnie został zaproponowany do opisu układów *f* elektronowych, model sieci Andersona rozszerzony o niezerową dyspersję skorelowanych stanów fermionowych [w równaniu (3) $\epsilon_f \rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}}^f$] jak pokazałem w pracy [p1] potrafi uchwycić istotne właściwości wielu metalicznych ferromagnetyków *d*-elektronowych (wtedy operatory *f* opisują stany *d*-elektronowe).

4.3.3 Wielociałowe metody numeryczne i związane z nimi przybliżenia

Ogromnym wyzwaniem w opisywaniu właściwości modeli z oddziaływaniem Hubbarda jest poprawne dostosowanie do rozważanego problemu najefektywniejszej wielociałowej metody oferującej uzyskanie możliwie najlepszych wyników. Prawdopodobnie najczęściej używana klasyfikacja metod dla problemów silnie skorelowanych fermionów bazuje na wykorzystanym przybliżeniu na poziomie jednocząstkowej funkcji Greena zależnej od wektora falowego \mathbf{k} i częstości ω , $G_{\mathbf{k}}(\omega)$. Dla celów demonstracyjnych rozważmy model Hubbarda (2). Efekty korelacji w jednocząstkowej funkcji Greena poprzez równanie Dysona uwzględnione są poprzez wielkość fizyczną zwaną energią własną $\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$,

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) = \left(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) \right)^{-1}, \quad (4)$$

gdzie $\epsilon_{\mathbf{k}}$ jest energią kinetyczną fermionów otrzymaną np. z przybliżenia ciasnego wiązania (czyli dla sieci kwadratowej przy całe przeskoku tylko do najbliższych sąsiadów $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$). Obliczenie zależności energii własnej zarówno od częstości jak i wektora falowego w dowolnej liczbie wymiarów jest niezwykle złożonym zagadnieniem i najczęściej wymaga przybliżeń. Z tego powodu dla uproszczenia obliczeń często stosuje się, rozłącznie bądź w połączeniu, dwa jakościowe przybliżenia. Pierwszym z nich jest założenie lokalności efektów korelacji (daje dokładne rozwiązanie w nieskończonej liczbie wymiarów [24]), które sprowadza się do braku zależności energii własnej od wektora falowego,

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) \simeq \Sigma(\omega). \quad (5)$$

Przybliżenie to charakteryzuje wszystkie teorie (nie klastrowe) pola średniego. Drugim szeroko stosowanym przybliżeniem jest uwzględnienie jedynie koherentnych niskoenergetycznych fluktuacji kwantowych

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) \simeq \Re \Sigma_{\mathbf{k}}(0) + \omega \frac{\partial \Re \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0}, \quad (6)$$

wymagających jedynie znajomości $\Re \Sigma_{\mathbf{k}}(0)$ i $\frac{\partial \Re \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0}$. Przybliżenie to wiedzie do kwazicząstkowego opisu fermionów, co natychmiast manifestuje się w jednocząstkowej funkcji Greena,

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) \simeq \frac{z_{\mathbf{k}}}{\omega - z_{\mathbf{k}}[\epsilon_{\mathbf{k}} - \Re \Sigma_{\mathbf{k}}(0)]}, \quad (7)$$

gdzie $z_{\mathbf{k}} \equiv (1 - \partial \Re \Sigma_{\mathbf{k}} / \partial \omega |_{\omega \rightarrow 0})^{-1}$ jest wagą kwazicząstkową. Z powyższej formy jednocząstkowej funkcji Greena wynika, iż w tym przybliżeniu fermiony zachowują się jakby nie oddziaływały, a jedynie posiadały znormalizowaną dyspersję. Przybliżenie to stanowi podstawę teorii Landaua ciecży Fermiego jak i metody diagramatycznego rozwinięcia funkcji falowej Gutzwillera [25]; drugiej metodzie poświęcę więcej uwagi w następnym paragrafie. W dalszej kolejności przedstawię krótką analizę użytych w większości moich prac [p1, p3-p6] metod wariacyjnych bazujących na funkcji falowej Gutzwillera na przykładzie modelu Hubbarda w odniesieniu do wprowadzonej klasyfikacji. W Tabeli 1 przedstawiona jest lista wybranych, popularnych metod wielociałowych (na niebiesko zaznaczone te użyte w moich pracach będących przedmiotem osiągnięcia naukowego) realizujących konkretne przybliżenia na energię własną.

Funkcja Gutzwillera jest skonstruowana z wyznacznika Slatera $|\psi_0\rangle$ zmodyfikowanego przez działanie lokalnych (na \mathbf{i} -tym węźle sieci) liniowych operatorów $P_{\mathbf{i}}$,

$$|\psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{i}} P_{\mathbf{i}} |\psi_0\rangle. \quad (8)$$

Liniowy operator $P_{\mathbf{i}}$ działa w lokalnej przestrzeni Focka rozpiętej przez cztery możliwe konfiguracje $|\Gamma\rangle_{\mathbf{i}} \in \{|0\rangle_{\mathbf{i}}, |\uparrow\rangle_{\mathbf{i}}, |\downarrow\rangle_{\mathbf{i}}, |\uparrow\downarrow\rangle_{\mathbf{i}}\}$,

$$P_{\mathbf{i}} = \sum_{\Gamma} \lambda_{\Gamma} |\Gamma\rangle_{\mathbf{i}} \langle \Gamma|. \quad (9)$$

$\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) \simeq$	$\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$	$\Sigma(\omega)$	$\Re\Sigma_{\mathbf{k}}(0) + \omega \frac{\partial \Re\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)}{\partial \omega} \Big _{\omega \rightarrow 0}$	$\Re\Sigma(0) + \omega \frac{\partial \Re\Sigma(\omega)}{\partial \omega} \Big _{\omega \rightarrow 0}$
Metoda	cDMFT, DCA,VMC	DMFT, GA+SWT	DE-GWF	GA

Tablica 1: Lista metod wielociałowych realizujących konkretne przybliżenia na energię własną. Niebieskim kolorem zaznaczone są metody wykorzystane, rozwinięte lub opracowane w pracach będących przedmiotem osiągnięcia naukowego. Lista skrótów: cDMFT - cellular dynamical mean-field theory [26], DCA - dynamical cluster approximation [26], VMC - variational Monte Carlo z korelatorem Jastrowa [27], DMFT - dynamical mean-field theory [10], GA+SWT - Gutzwiller approximation + Schrieffer-Wolff transformation [p5], DE-GWF - diagrammatic expansion of Gutzwiller wave function [25], GA - Gutzwiller approximation.

Ideą funkcji Gutzwillera jest wybór operatora $P_{\mathbf{i}}$ w taki sposób aby pozostał pojedynczy wariacyjny parametr optymalizujący prawdopodobieństwo podwójnych obsadzeń, które z powodu rosnących oddziaływań naturalnie powinno się zmniejszać. Użytecznym wyborem jest operator spełniający [25]

$$P_{\mathbf{i}}^{\dagger} P_{\mathbf{i}} = 1 + x d_{\mathbf{i}}. \quad (10)$$

gdzie x jest parametrem wariacyjnym i

$$d_{\mathbf{i}} = (n_{\mathbf{i}\uparrow} - \langle \psi_0 | n_{\mathbf{i}\uparrow} | \psi_0 \rangle) (n_{\mathbf{i}\downarrow} - \langle \psi_0 | n_{\mathbf{i}\downarrow} | \psi_0 \rangle). \quad (11)$$

Dla przykładu wartość oczekiwaną z lokalnego operatora na węźle \mathbf{i} – *tym* (np. z oddziaływania Hubbarda) względem funkcji falowej Gutzwillera można zapisać w następujący sposób [25]

$$\langle \psi_G | \mathcal{O}_{\mathbf{i}} | \psi_G \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \sum'_{\mathbf{l}_1, \dots, \mathbf{l}_k} \langle \psi_0 | P_{\mathbf{i}}^{\dagger} \mathcal{O}_{\mathbf{i}} P_{\mathbf{i}} d_{\mathbf{l}_1} \dots d_{\mathbf{l}_k} | \psi_0 \rangle, \quad (12)$$

gdzie suma z apostrofem oznacza, $\mathbf{l}_1 \neq \mathbf{l}_k \neq \mathbf{i}$.

Mimo prostoty zapisu, obliczenie prawej strony równania (12) nie jest możliwe w sposób ścisły w granicy termodynamicznej, ze względu na sumowanie nieskończonej liczby wyrazów. Jednakże sumowanie to da się wykonać dla skończonej sieci, co wyznacza naturalne obcięcie w nieskończonych sumach w (12) a efektywna optymalizacja wartości oczekiwanych może być przeprowadzona za pomocą metody Monte Carlo (metoda znana jako *variational Monte Carlo*, VMC). Sprawdzenie dokładności obliczeń sprowadza się do kontroli zbieżności wyników w zależności od rozmiaru skończonego układu. Z drugiej strony obcięcie w nieskończonych sumach jak zostało zaproponowane w metodzie diagramatycznego rozwinięcia funkcji falowej Gutzwillera (Diagrammatic Expansion of the Gutzwiller Wave Function, DE-GWF) [25] można wprowadzić zakładając zerujące się wartości oczekiwane z operatorów indeksowanych wskaźnikami sieci (\mathbf{i}, \mathbf{j}), oddalonych od siebie o wybrany dystans (np. $|\mathbf{i} - \mathbf{j}| > l$) jak i uwzględnienie skończonej liczby elementów sumy po k w równaniu (12). W tym wypadku sprawdzenie dokładności obliczeń sprowadza się do kontroli zbieżności wyników w zależności od l i k . Okazuje się, że niektóre właściwości są już bardzo dobrze opisane nawet w zerowym rzędzie rozwinięcia ($k = 0$) nazywanym przybliżeniem Gutzwillera (Gutzwiller approximation - GA). Przybliżenie to jest bardzo efektywne gdyż prowadzi do zwięzłych analitycznych wyników na wartości oczekiwane. Formalnie przybliżenie Gutzwillera bierze pod uwagę jedynie lokalne efekty oddziaływania i staje się wariacyjnie dokładne w nieskończonej liczbie wymiarów [24].

Niezależnie od rozważanego rzędu, czyli zarówno metoda GA jak i DE-GWF sprowadza problem fermionów oddziałujących do efektywnego Hamiltonianu opisującego swobodne fermiony ze zrenormalizowanymi charakterystykami. Dla przykładu rozważania dotyczące modelu Hubbarda prowadzą do następującego efektywnego Hamiltonianu,

$$H_{\text{eff}} \sim \sum_{\mathbf{k}, \sigma} g_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (13)$$

gdzie w przybliżeniu GA, $q_{\mathbf{k}} = q$ jest zwięzającym czynnikiem Gutzwillera. Jednocząstkowa funkcja Greena dla takiego efektywnego Hamiltonianu wskazuje, iż wariacyjnie wyznaczony czynnik $q_{\mathbf{k}}$ może być utożsamiony z wagą kwazicząstkową $z_{\mathbf{k}}$ w (7). Z tego powodu obie metody (GA i DE-GWF) są zgodne z przybliżeniem (6), a GA jest przybliżeniem dodatkowo prowadzącym do lokalnej (niezależnej od wektora falowego) energii własnej (5), co formalnie realizują się jedynie w nieskończonej liczbie wymiarów [24]. W kontekście metody funkcji falowej Gutzwillera istotna jest uwaga dotycząca metody VMC. Współcześnie, metoda VMC sprowadza się do wykorzystania wariacyjnej funkcji falowej Gutzwillera rozszerzonej o korelator Jastrowa [27], który jest w stanie uwzględnić właściwości układu poza przybliżeniem kwazicząstkowym (6). Stąd w Tabeli 1 metoda VMC, choć limitowana przez skończony rozmiar badanego układu zakwalifikowana jest jako uwzględniająca pełną energię własną skorelowanych fermionów.

Dla modelu Hubbarda i pokrewnych modeli (np. modelu sieci Andersona) bardzo ważną i niepodpadającą w bezpośredni sposób pod klasyfikację bazującą na energii własnej jest metoda transformacji kanonicznej. W granicy dużych oddziaływań $U \gg t$ można wyszczególnić w modelu Hubbarda nisko-energetyczną podprzestrzeń (NEP) bez podwójnych obsadzeń i wysoko-energetyczną podprzestrzeń (WEP) z podwójnymi obsadzeniami. W tym celu operator przeskoku $T_{ij} \equiv \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{H.c.})$ na wiązaniu $\langle ij \rangle$ może zostać podzielony na części działające w NEP i WEP oraz część mieszającą obydwie podprzestrzenie. Mieszające wyrazy mogą być formalnie zdefiniowane przez $\tilde{T}_{ij} \equiv P_{20} T_{ij} P_{11}$ i $\tilde{T}_{ij}^{\dagger} \equiv P_{11} T_{ij} P_{20}$ gdzie $P_{nm} \equiv \mathcal{P}_{i;n} \mathcal{P}_{j;m} + (1 - \delta_{nm}) \mathcal{P}_{i;m} \mathcal{P}_{j;n}$, δ_{nm} jest deltą Kroneckera i $\mathcal{P}_{i;n}$ jest operatorem rzutowym na węzeł i z konfiguracją z $n \in \{0, 1, 2\}$ fermionami. Perturbacyjna metoda transformacji kanonicznej polega na usunięciu w wiodącym rzędzie mieszania między podprzestrzeniami co pozwala na efektywny opis zawężony jedynie do niskoenergetycznej podprzestrzeni w ramach tzw. Hamiltonianu $t - J$ [8],

$$H_{t-J} = -t \sum_{ij\sigma} (1 - n_{i\bar{\sigma}}) c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} (1 - n_{j\bar{\sigma}}) + J \sum_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (14)$$

w którym kluczowym elementem jest oddziaływanie wymienne pomiędzy spinami na sąsiednich węzłach sieci (operatory \mathbf{S}) o amplitudzie $J = 4t^2/U$. Źródło tego oddziaływania jest w wysoko-energetycznych fluktuacjach kwantowych (wirtualne procesy generowane poprzez mieszanie się podprzestrzeni NEP i WEP). Te są automatycznie uwzględnione w niekoherentnej części energii własnej (nie kwazicząstkowej) gdy jej pełna zależność od częstości jest uwzględniona (np. w metodach typu dynamicznego pola średniego i jej rozszerzeniach: DMFT, DCA, cDMFT³ [26]). Jak pokazaliśmy w pracach [p5,p6], wysoko-energetyczne fluktuacje mogą być również uwzględnione w sposób bezpośredni w funkcji falowej Gutzwillera za pomocą wariacyjnej transformacji kanonicznej (Gutzwiller approximation + Schrieffer-Wolff transformation, GA+SWT). Jest to alternatywne rozwiązanie do tego oferowanego przez metodę VMC gdzie korelator Jastrowa [27] emuluje pojawianie się par dublon - holon⁴ należących do podprzestrzeni WEP na skutek wysoko-energetycznych fluktuacji kwantowych.

Ten sam typ transformacji zaaplikowanej do modelu sieci Andersona w granicy nieskończonego U prowadzi do niskoenergetycznego modelu sieci Kondo,

$$H_{KLM} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + J_K \sum_{\mathbf{i}} S_{\mathbf{i}} \cdot s_{\mathbf{i}} \quad (15)$$

gdzie spiny stanów tworzących nieskorelowane pasmo na każdym węźle oddziałują z pojedynczym spinem zlokalizowanego elektronu na orbitalu f . Oddziaływanie to nosi nazwę oddziaływania Kondo.

Zupełnie nowym wyzwaniem dla metod numerycznych stanowi zagadnienie czasowej ewolucji układu skorelowanych fermionów w odpowiedzi na nierównowagową zmianę mikroskopowych parametrów opisującego go modelu. W tym wypadku metody, przystępne pod względem niezbędnego

³DMFT - dynamical mean-field theory, DCA - dynamical cluster approximation, cDMFT - cellular dynamical mean-field theory

⁴Dublon jest tożsamy z podwójnym obsadzeniem węzła, natomiast holon z brakiem obsadzenia węzła. Para dublon-holon pojawia się gdy elektron z pojedynczo obsadzonego węzła przeskakuje na pojedynczo obsadzony węzeł.

czasu obliczeniowego dla problemów równowagowych, często pozwalają na symulowanie tylko relatywnie krótkich czasów ewolucji układu. Jest to widoczny problem przy nierównowagowej analizie układów mogących realizować stan izolatora Motta. Numerycznie dokładny opis izolatora Motta w równowadze jest oferowany przez metodę DMFT zaaplikowaną do modelu Hubbarda w nieskończonej liczbie wymiarów (np. na nieskończenie skoordynowanej sieci Bethego). Rozszerzenie tej metody do domeny czasowej, z przyczyn wzrostu numerycznej złożoności, pozwala na dostęp do ewolucji wzbudzonego, zamkniętego układu na relatywnie krótkiej skali czasowej kiedy energia jest zachowana [14]. Z tego powodu istnieje ogromne zapotrzebowanie na metody, porównywalne pod względem dokładności a pozwalające na uchwycenie znacznie dłuższych czasów ewolucji przy mniejszych wymaganiach mocy obliczeniowej. Jedną z takich metod została opracowana w cyklu dwóch prac [p5, p6] będących częścią referowanego osiągnięcia naukowego. Mianowicie zaproponowaliśmy połączenie funkcji falowej Gutzwillera opisującej kwazicząstkowe właściwości układu z wariacyjną transformacją kanoniczną uwzględniającą wysokoenergetyczne fluktuacje. Metoda zastosowana do przejścia Motta w równowadze w nieskończenie wymiarowym modelu Hubbarda okazała się mieć znakomitą dokładność, porównywalną z metodą DMFT, przy jednocześnie znacznie mniejszych wymaganiach dotyczących mocy obliczeniowej [p5]. Natomiast rozszerzona przez nas metoda do sytuacji nierównowagowych pozwoliła na badanie układu na praktycznie nieograniczonej skali czasowej [p6].

4.3.4 Szczegółowy opis wyników zawartych w pracach [p1-p7]

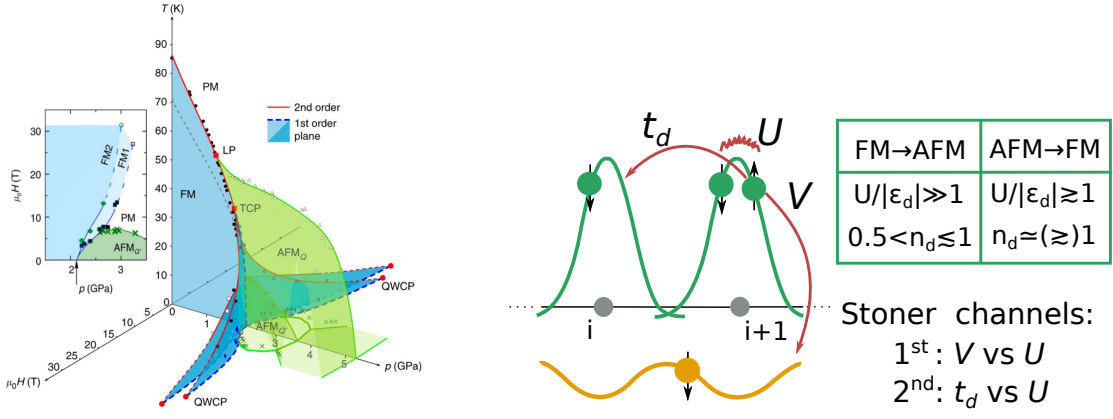
W niniejszym rozdziale szczegółowo omówione zostały wyniki otrzymane w pracach [p1-p7]. Opis każdej z prac opatrzony jest ramką z krótkim i hasłowym wykazem najistotniejszych wyników. Dodatkowo pod koniec każdego z opisów zamieszczona jest informacja o moim indywidualnym wkładzie w powstanie danej pracy jak również o związanej z daną pracą aktywności konferencyjnej jeżeli takowa była.

[p1] Przemiany między fazami ferromagnetyczną i antyferromagnetyczną w układach d -elektronowych metalicznych magnetyków

- Zaproponowanie mikroskopowego mechanizmu prowadzącego do przejść fazowych między wędrownym ferromagnetyzmem (FM) a antyferromagnetyzmem (AFM) w d -elektronowych metalicznych związkach chemicznych.
- Wykazanie, że ze wzrostem ciśnienia obie sekwencje, FM/AFM lub AFM/FM, przemian mogą być realizowane w d -elektronowych metalicznych związkach chemicznych. Możliwość realizacji konkretnej przemiany zależy w szczególności od głównej liczby kwantowej powłoki d i stanu utlenienia.
- Opracowany mechanizm pozwala na konsystentną interpretację niedawnych obserwacji przemiany ferromagnetyk-antyferromagnetyk w LaCrGe_3 [3, 28]

Wędrowny magnetyzm w pierwiastkach, jak np. ferromagnetyzm w żelazie, jest dość dobrze teoretycznie opisany. Z drugiej jednak strony, ferromagnetyzm wędrowny w szerokiej gamie związków chemicznych, takich jak ZrZn_2 , UGe_2 , MnSi czy LaCrGe_3 , wciąż stanowi wyzwanie dla teorii [29]. Kluczową cechą tych układów jest obserwacja przy obniżaniu temperatury i zwiększaniu przyłożonego ciśnienia zmiany charakteru przemiany magnetycznej z ciągłej na nieciągłą (np. ZrZn_2 , UGe_2 , MnSi [29]) lub też przejście do fazy przestrzennie modulowanej (np. LaCrGe_3 [3, 28], CeRuPO [30]). Dla pierwszej grupy związków badania w polu magnetycznym pokazały, iż granice faz ferromagnetycznych i paramagnetycznych tworzą charakterystyczną strukturę tzw. *trójkrytycznych skrzydeł* [29] (Rys.2). Dla drugiej grupy związków ferromagnetycznych, dla których obserwuje się przejście do fazy antyferromagnetycznej pojawienie się *trójkrytycznych skrzydeł* nie jest już typowe. Z tego powodu diagram fazowy LaCrGe_3 [3, 28] (Rys.2, lewy panel), na którym faza przestrzennie modulowana pojawia się między *skrzydłami* jest wyjątkowy.

Z teoretycznego punktu widzenia magnetyzm wędrowny w modelach skorelowanych fermionów jest zazwyczaj dość dobrze opisany już na poziomie przybliżenia pola średniego. Przybliżenie to załamuje się jednak w pobliżu kwantowego przejścia fazowego, gdzie kwantowe fluktuacje parametru porządku silnie wpływają na właściwości układu. W takim przypadku z pomocą przychodzi teorie bazujące na transformacji Stratonovicha-Hubbarda. Pokazano, iż uwzględnienie w przybliżeniu punktu siodłowego kwantowych fluktuacji parametru porządku prowadzi do zniesienia kwantowego punktu krytycznego na rzecz przemiany pierwszego rodzaju [31] (i w konsekwencji *trójkrytycznych skrzydeł* [32]) lub pojawienia się fazy antyferromagnetycznej [31, 33]. Stąd podejście to często nazywane jest *quantum criticality avoidance theory* (QCA). Należy podkreślić jednakże, iż podejście QCA bazuje na kwazi-fenomenologicznym założeniu, iż układ, przy braku fluktuacji parametru porządku realizowałby kwantowy punkt krytyczny. Pojawia się naturalne pytanie czy w szerokiej gamie ferromagnetycznych związków chemicznych kwantowe fluktuacje zawsze determinują obserwacje takie jak *trójkrytyczne skrzydła* i pojawienie się fazy antyferromagnetycznej? Czy też może istnieje alternatywne wyjaśnienie? W pracach [21–23] będących częścią mojego doktoratu na przykładzie konkretnego materiału UGe_2 zaproponowaliśmy, iż zarówno obserwacje przejścia pierwszego rodzaju w zerowej temperaturze jak i *trójkrytyczne skrzydła* mogą być zinterpretowane bez uwzględnienia



Rysunek 2: (Lewy panel) Diagram fazowy metalicznego ferromagnetyka LaCrGe_3 względem ciśnienia, temperatury i pola magnetycznego przedstawiający charakterystyczny kształt granic fazy ferromagnetycznej zwany trójkrytycznymi skrzydłami wraz ze wstawką z rzutem dla $T = 2\text{K}$ (zapożyczony z Ref. [28]). (Prawy panel) Schematyczny rysunek przedstawiający stosunkowo dobrze zlokalizowane stany d-elektronowe (zielony kolor) hybrydujące z rozciągłymi stanami ligandu (żółty kolor). Rysunek ilustruje niezbędne składowe modelu realizującego zaproponowany w pracy [p1] dwu-kanalowy mechanizm Stonera. W tabeli umieszczone są warunki konieczne dotyczące parametrów opisujących charakter stanów d -orbitalnych (U - oddziaływanie, ϵ_d - poziom atomowy, n_d - wypełnienie) sugerujące możliwość przejścia ferromagnetyk/antyferromagnetyk bądź antyferromagnetyk/ferromagnetyk wraz ze wzrostem ciśnienia.

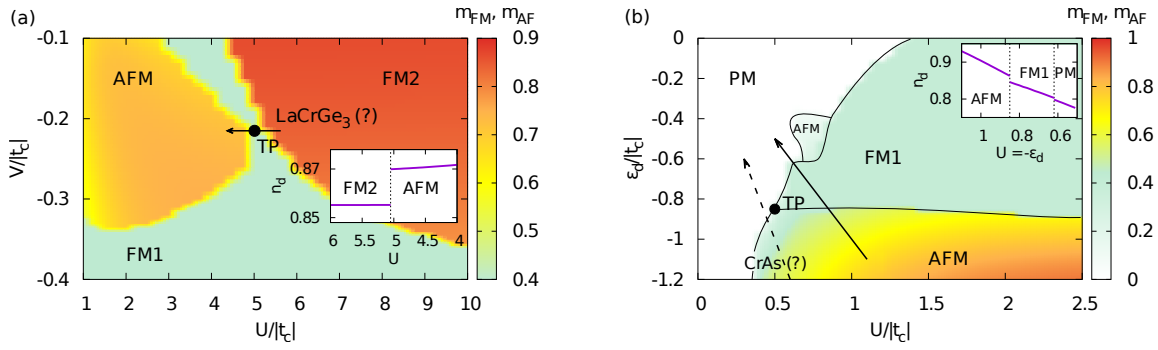
kwantowych fluktuacji jeżeli uwzględnimy typową sytuację mieszania się skorelowanych elektronów z pasmem ligandu w pobliżu poziomu Fermiego.

W przedstawionej historii dotyczącej ferromagnetyków wędrownych pojawiają się dwa problemy, które pozytywnie rozwiązała praca [p1]. Pierwszy to pytanie czy pojawienie się fazy antyferromagnetycznej wraz ze wzrostem ciśnienia w ferromagnetyku może być również wyjaśnione bez udziału kwantowych fluktuacji. Drugi problem to czy jedynie przemiana FM/AFM ze wzrostem ciśnienia jest realizowalna w metalicznych magnetykach czy też spodziewać się można również odwrotnej przemiany AFM/FM. Ta kwestia jest istotna między innymi w kontekście niedawnych badań w ramach fenomenologicznej teorii Landaua [34] badającej możliwe przejścia fazowe między fazami FM i AFM.

W pracy [p1], analizując obliczenia z pierwszych zasad dla wielu ferromagnetyków wędrownych zauważyłem, iż wspólną cechą części z nich (LaCrGe_3 , ZrZn_2 , UIr , UGe_2) jest mieszanie się skorelowanych stanów orbitalnych typu f lub d z nieskorelowanymi stanami ligandu w pobliżu poziomu Fermiego. Rozszerzając analizę o antyferromagnetyki wędrowne okazało się, iż struktura pasmowa związku CrAs ma ten sam charakter. Bazując na tej bardzo ogólnej właściwości skonstruowałem mikroskopowy *dwu-kanalowy mechanizm Stonera*, który przewiduje przejścia fazowe między ferromagnetyzmem i antyferromagnetyzmem w d -elektronowych związkach chemicznych. Minimalny opis mieszania się skorelowanych stanów d z nieskorelowanymi stanami ligandu jest możliwy w ramach dwupasmowego modelu d - p [rozszerzony model (3)]

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}}^d \hat{d}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i}\uparrow}^d \hat{n}_{\mathbf{i}\downarrow}^d + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}}^c \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (V_{\mathbf{k}} \hat{d}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.}). \quad (16)$$

Powyżej operatory \hat{d} i \hat{c} odnoszą się odpowiednio do skorelowanych orbitali d i nieskorelowanych orbitali ligandu. Znaczne korelacje elektronowe między stanami d są uwzględnione przez wewnątrz-orbitalne oddziaływanie Hubbarda z amplitudą U . Należy podkreślić, że Hamiltonian d - p rozważany w pracy [p1] nie ma na celu modelowania realistycznej struktury elektronowej a raczej służy do zobrazowania sytuacji mieszania się stanów o różnym stopniu korelacji. Z tego względu została wybrana prosta parametryzacja modelu z niezależną od pędu hybrydyzacją $V_{\mathbf{k}} = V$ i wewnątrz-orbitalną energią kinetyczną $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$ i $\epsilon_{\mathbf{k}}$ odpowiednio dla skorelowanych i nieskorelowanych podsystemów



Rysunek 3: Magnetyczne diagramy fazowe na płaszczyźnie (a) oddziaływanie - hybrydyzacja ($U-V$) dla $\varepsilon_d = -0.95$ i (b) oddziaływanie - atomowy poziom d -orbitali ($U-\varepsilon_d$) dla $V = -0.25$ (w obydwu przypadkach $n_t = 1.6$). Skala koloru odnosi się do całkowitego momentu magnetycznego w każdej z faz. Strzałki wyznaczają potencjalny kierunek przejścia związany ze wzrostem ciśnienia. Wstawki przedstawiają zmianę wypełnienia orbitali d wzdłuż ciągłych strzałek przechodzących przez przejścia (a) ferromagnetyk/antyferromagnetyk i (b) antyferromagnetyk/ferromagnetyk.

z dyspersją proporcjonalną do $\xi_{\mathbf{k}} \equiv -2(\cos k_x + \cos k_y)$, czyli, $\epsilon_{\mathbf{k}}^{\alpha \in \{c,d\}} = \epsilon_{\alpha} + t_{\alpha} \xi_{\mathbf{k}}$ z arbitralnie wybranym $\epsilon_c = 0$ i $t_d \ll t_c$.

W ramach modelu (16) zaproponowałem, iż magnetyzm w układzie zmieszanych skorelowanych i nieskorelowanych orbitali może pojawić się jako niestabilność typu Stonera na skutek konkurencji pomiędzy energią oddziaływań U stanów na orbitalach d , a dwoma różnymi rodzajami energii kinetycznej: tej pochodzącej od hybrydyzacji, V (pierwszy kanał Stonera) i tej pochodzącej od bezpośrednich przeskoków pomiędzy orbitalami d , t_d (drugi kanał Stonera) - porównaj z prawym panelem Rysunku 2.

Pozornie subtelne rozróżnienie pomiędzy dwoma kanałami Stonera ma znaczne konsekwencje dla rodzaju realizowanego stanu magnetycznego. W pracy [p1] rozwiązałem model $d-p$ za pomocą metody przybliżenia Gutzwillera, korzystającego z przybliżeń (5) i (6) [Roz. 4.3]. Przybliżenia te są uzasadnione przez wybór sumarycznego wypełnienia pasm dalekiego od całkowitej wartości, $n_t = 1.6$ co pozwala na pominięcie niekoherentnych efektów związanych z fizyką Motta lub Kondo. Otrzymane wyniki pokazują, iż rodzaj faworyzowanego porządku magnetycznego może być różny ze względu na sprzężenie pierwszego kanału Stonera z całkowitym wypełnieniem obydwu pasm a drugiego kanału Stonera z wypełnieniem tylko orbitali d . W obydwu wypadkach wypełnienie w pobliżu całkowitej wartości sprzyja fazie antyferromagnetycznej a daleko od całkowitej wartości prowadzi do ferromagnetyzmu. Podczas gdy całkowite wypełnienie obydwu pasm jest ustalone w danej sytuacji, wypełnienie tylko d -orbitali może się drastycznie zmienić w odpowiedzi nawet na małe zmiany mikroskopowych parametrów układu np. na skutek ciśnienia. W rezultacie wyznaczyłem parametryzację modelu (porównaj z tabelą na Rys. 2), która zgodnie z zaproponowanym mechanizmem i fizycznym oczekiwaniem dotyczącym zmian mikroskopowych parametrów, wraz ze wzrostem ciśnienia przewiduje istnienie zarówno przejść fazowych ferromagnetyzm/antyferromagnetyzm jak i antyferromagnetyzm/ferromagnetyzm (Rys. 3). Sformułowałem ogólne zasady, które na podstawie łatwo dostępnych informacji na temat materiału takich jak np. ogólna konfiguracja stanów utlenienia, kwalifikuje dany magnetyczny związek chemiczny jako potencjalnego kandydata do realizacji dwu kanałowego mechanizmu Stonera. Bardzo obiecującym wynikiem jest to, iż materiał LaCrGe_3 , w którym niedawno zaobserwowano przejście FM/AFM [3, 28], ma odpowiednie właściwości, dla których dwu-kanałowy mechanizm Stonera przewiduje odpowiednie magnetyczne przejście fazowe FM/AFM. Dodatkowo, dla tego materiału dwu-kanałowy mechanizm Stonera jest w stanie teoretycznie opisać zarówno pojawienie się dwóch faz ferromagnetycznych FM1 i FM2 jak i punktu potrójnego. Z drugiej strony pokazałem, że właściwości antyferromagnetyka wędrownego CrAs wskazują, zgodnie z dwu kanałowym mechanizmem Stonera, na możliwe przejście w tym materiale do fazy ferromagnetyka pod ciśnieniem. Takie zachowanie również sugerują niedawne obliczenia z pierwszych zasad [35].

Z eksperymentalnego punktu widzenia określenie wektora modulacji \mathbf{q} w fazie antyferromagnetycznej wyłaniającej się z ferromagnetyzmu na skutek ciśnienia w LaCrGe_3 jest szansą na określenie, jaki mechanizm jest realizowany w tym materiale. Krótki wektor ($|\mathbf{q}| \sim 0$) wskazywałby na mechanizm bazujący na kwantowych fluktuacjach podczas gdy długi wektor ($|\mathbf{q}| \sim \pi$) bliski porządkowi Néela sugerowałby mechanizm zaproponowany w pracy [p1] bazujący na charakterystycznej strukturze pasmowej. Najnowsze, eksperymentalne doniesienia nie są konkluzywne [36] i wskazują na istnienie antyferromagnetycznie sprzężonych domen ferromagnetycznych w LaCrGe_3 pod ciśnieniem.

Indywidualny wkład:

Praca [p1] jest w całości wykonana przeze mnie.

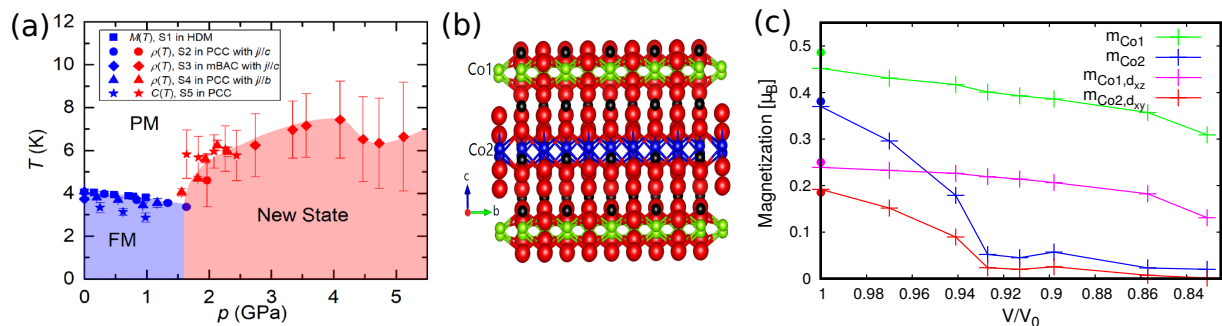
Aktywność konferencyjna dotycząca wyników pracy [p1]:

- W maju 2019 na konferencji “Quantum Ferromagnetism and Related Phenomena”(Max Planck Institute for Complex Systems, Drezno, Niemcy) **na zaproszenie organizatorów** (D. Belitz, M. Brando i A. Huxley) wygłosiłem wykład zatytułowany “Two-channel Stoner mechanism for ferromagnetic/antiferromagnetic phase transitions in metallic magnets”
[zob. <https://www.pks.mpg.de/qfm19>]
- W czerwcu 2019, na konferencji “Superstripes 2019” (Rome International Center for Materials Science of Superstripes, Ischia, Włochy) **na zaproszenie organizatora** (A. Bianconi) wygłosiłem wykład zatytułowany “Two-channel Stoner mechanism for ferromagnetic/antiferromagnetic phase transitions in metallic magnets”
[zob. <https://www.superstripes.net/superstripes-2019/invited-speakers>]
- We wrześniu 2018, na konferencji “From Spins to Cooper Pairs: Fundamental Aspects of Superconductivity” (Zakopane) **na zaproszenie organizatora** (J. Spałek) wygłosiłem wykład zatytułowany “Mechanisms of phase transitions between ferro- and antiferromagnetic orderings in itinerant d and f electron materials”
[zob. <http://th-www.if.uj.edu.pl/ztms/pl/conference2018/speakers.php>]

[p2] Przestrzennie modulowany, orbitalnie selektywny ferromagnetyzm w $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ i jego ewolucja z ciśnieniem

- Pokazanie, iż ferromagnetyzm w $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ pochodzi z dwóch różnych orbitali na krystalograficznie nierównoważnych atomach kobaltu Co1 i Co2
- Pokazanie, iż różnica między momentem magnetycznym na atomach Co1 i Co2, początkowo niewielka, dramatycznie rośnie wraz ze wzrostem ciśnienia.
- Zaproponowanie prostego modelu, który pokazał, iż przestrzenna modulacja magnetyzacji pozwala na zinterpretowanie anomalii w pomiarach oporności w $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ [5].

Badania transportu i magnetyzacji w ferromagnetyku wędrownym $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ zasugerowały, iż wraz z ciśnieniem pojawia się nowy stan magnetyczny [5] (zob. Rys. 4a), prawdopodobnie przestrzennie modulowany. Z tego powodu zostało zasugerowane w pracy [5], iż ten materiał może stanowić kolejny przykład przejścia FM/AFM w magnetyku wędrownym wraz ze wzrostem ciśnienia. W kontekście opisanych teorii w opisie poprzedniej pracy [p1], autorzy eksperymentu wskazali na interpretację zgodną z teorią *quantum criticality avoidance*. Aby rzucić więcej światła na pojawienie się nowego stanu, jak również aby sprawdzić potencjalne zastosowanie dwu-kanałowego mechanizmu



Rysunek 4: (a) Diagram fazowy $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ z pracy [5]. (b) Struktura krystaliczna $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ w płaszczyźnie c - b . Zielone sfery oznaczają atomy kobaltu Co1 i Co2, a czerwone i czarne atomy La i Ge. (c) Otrzymana w pracy [p2] ewolucja momentów magnetycznych na atomach Co1 i Co2, zarówno sumaryczna jak ta pochodząca z wiodących orbitali d_{xz} na Co1 i d_{xy} na Co2.

Stonera w pracy [p2] analizowaliśmy strukturę pasmową $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ otrzymaną za pomocą metody funkcjonału gęstości (DFT-density functional theory) w przybliżeniu LDA (local density approximation).

Nasza analiza pokazała, iż $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ jest kwazi-jednowymiarowym, orbitalnie selektywnym ferromagnetykiem. Mianowicie, w $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ różne orbitale typu d na krystalograficznie nierównoważnych atomach kobaltu, Co1 i Co2 są odpowiedzialne za niezerową magnetyzację. W efekcie moment magnetyczny na atomach Co1 i Co2 może być różny, co zważywszy na strukturalne ułożenie atomów (Rys. 4b) powoduje przestrzenną modulację magnetyzacji wzdłuż osi c . Pokazaliśmy, iż amplituda modulacji, początkowo niewielka dramatycznie wzrasta wraz ze wzrostem ciśnienia (zob. Rys. 4c). Za pomocą prostego modelu pokazaliśmy, że taka modulacja może powodować anomalię w pomiarach oporności, która w pracy [5] została powiązana z pojawieniem się nowego stanu.

Nasza interpretacja sugeruje, że nowy stan jest tą samą fazą co ta realizowana przy ciśnieniu otoczenia, z tym, że charakteryzuje się znacznie większą różnicą pomiędzy momentami magnetycznymi na atomach Co1 i Co2. Stąd pojawia się pytanie jakiego zachowania można się spodziewać dla ciśnień większych niż zbadane 5GPa. Ponieważ skorelowane stany d nie mieszają się ze słabiej skorelowanymi stanami s i p w okolicy powierzchni Fermiego, oznacza, iż $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ nie spełnia podstawowego założenia wymaganego przez dwu-kanalowy mechanizm Stonera. Z tego powodu, dla ciśnień większych niż 5GPa, jeśli T_c spadnie w kierunku zera, można się spodziewać efektów związanych z fluktuacjami kwantowymi.

Indywidualny wkład:

W pracy [p2] zaproponowałem temat badawczy, byłem głównym autorem interpretacji otrzymanych przez G. Cuono and C. Autieri wyników DFT jak i byłem autorem modelu zabawki opisującego otrzymany porządek magnetyczny w $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ tłumaczącego pojawienie się anomalii w oporności. Również byłem autorem tekstu publikacji za wyjątkiem rozdziału II publikacji dotyczącego szczegółów obliczeń DFT.

Aktywność seminaryjna:

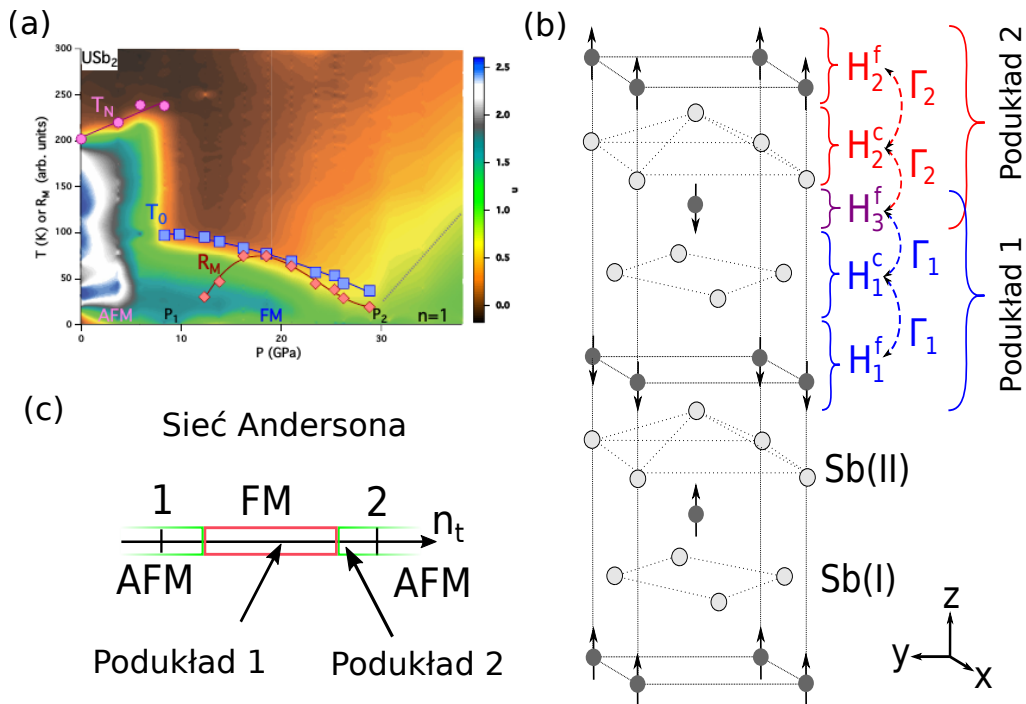
W kwietniu 2021 zostałem zaproszony przez profesora P. Canfield'a do wygłoszenie seminarium online w Ames Laboratory (USA) na temat otrzymanych w pracy [p2] wyników.

[p3] Niestandardowy porządek antyferromagnetyczny $\uparrow\downarrow\uparrow$ i przemiana do fazy ferromagnetycznej w USb_2

- Zaproponowanie mikroskopowego modelu bazującego na orbitalnej selektywności który pozwala na interpretację niestandardowego porządku antyferromagnetycznego typu $\uparrow\downarrow\uparrow$ w USb_2 .
- Zaproponowanie wyjaśnienia przejścia fazowego z antyferromagnetyzmu do ferromagnetyzmu pod ciśnieniem w USb_2 .
- Orbitalna selektywność w USb_2 została później zaobserwowana w dwóch eksperymentach [37, 38].

Magnetyczne przejście fazowe antyferromagnetyk/ferromagnetyk wraz ze wzrostem ciśnienia zostało niedawno odkryte w związku USb_2 [4] (zob. Rys. 5a). Jednakże magnetyczne właściwości tego materiału są bardzo interesujące już pod normalnym ciśnieniem. Mianowicie USb_2 realizuje niestandardowy antyferromagnetyczny porządek typu $\uparrow\downarrow\uparrow$ wzdłuż osi krystalograficznej [001] [39] (zobacz schematyczny rysunek magnetycznej komórki elementarnej na Rys. 5b).

Eksperymentalne obserwacje w USb_2 sugerują różne poziomy atomy nierównoważnych krystalograficznie atomów antymonu [42] [Sb(I) i Sb(II) - porównaj z Rys. 5b]. W ten sposób zlokalizowane stany w orbitalach f pochodzących od uranu hybrydując ze stanami pochodzącymi od Sb(I) jak i Sb(II) powinny prowadzić do innego obrazu kwazicząstkowego w każdym z przypadków. W pracy [p3] pokazałem, iż opisana orbitalna selektywność może prowadzić do niestandardowego porządku antyferromagnetycznego typu $\uparrow\downarrow\uparrow$ wzdłuż osi krystalograficznej [001]. Konkretnie, korzystając dodatkowo z faktu, iż eksperymentalne obserwacje sugerują również słabą dyspersję powierzchni Fermiego wzdłuż osi z [41] zaproponowałem, iż właściwości USb_2 są zdeterminowane przez fizykę dwóch,



Rysunek 5: (a) Diagram fazowy USb_2 względem ciśnienia i temperatury - zapożyczony z Ref. [4]. (b) Struktura magnetycznej komórki elementarnej związku USb_2 wraz z znaczącymi słabo sprzężonymi podukładami. (c) Schematyczny, magnetyczny średniopółowy diagram fazowy realizowany przez model sieci Andersona (porównaj np. z Ref. [40]).

dwu-podsieciowych, dwu-wymiarowych w płaszczyźnie $x-y$, podukładów (Rys. 5b). Natomiast sprzężenie pomiędzy podukładami pojawia się tylko na skutek współdzielenia jednej z podsieci orbitali f pochodzących od atomów uranu. W efekcie zaproponowałem, iż minimalny opis każdego z podukładów jest oferowany przez model sieci Andersona (3). Z powodu równoważności krystalograficznej atomów uranu wypełnienie jak i moment magnetyczny na orbitalach f powinien być taki sam dla każdego z podukładów. Jednocześnie niższy poziom atomowy antymonu Sb(II) [42] wskazuje na to, iż podukład 2 powinien mieć większe wypełnienie pasma przewodnictwa niż podukład 1. Z drugiej strony porządek magnetyczny realizowany przez model sieci Andersona można bardzo schematycznie przedstawić na diagramie fazowym na Rys. 5c gdzie parametrem kontrolnym jest całkowite wypełnienie obydwu pasm, n_t . Z tej perspektywy, spójnie z rozważaniem na temat dwóch słabo sprzężonych podukładów, można sobie wyobrazić, iż różnica w całkowitym wypełnieniu pasm w obydwu podukładach powoduje realizowanie się ferromagnetyzmu w podukładzie 1 i antyferromagnetyzmu w podukładzie 2 (porównaj ze strzałkami na Rys. 5c). W pracy [p3] przedstawiłem numeryczne wyniki dotyczące właściwości magnetycznych dwóch samozgodnie sprzężonych modeli sieci Andersona rozwiązanych metodą przybliżenia Gutzwillera potwierdzające, iż przedstawiony scenariusz rzeczywiście może prowadzić do niestandardowej struktury magnetycznej zaobserwowanej w USb₂ (porównaj z Rys. 5b).

Zaproponowana interpretacja właściwości magnetycznych USb₂ pod normalnym ciśnieniem pozwoliła również na zaproponowanie wyjaśnienia przejścia fazowego do ferromagnetyzmu pod ciśnieniem (zobacz Rys. 5a). Efekt ciśnienia w sieci Andersona jest najczęściej uwzględniany przez wzrost hybrydyzacji i podniesienie się poziomu atomowego stanów f . Zmiana tych parametrów, jak pokazałem na podstawie obliczeń numerycznych w pracy [p3], prowadzi dla drugiego podukładu do przejścia z fazy antyferromagnetycznej do ferromagnetycznej, podczas gdy pierwszy podukład ciągle realizuje ferromagnetyzm. W efekcie pod wpływem ciśnienia zaproponowany model przewiduje przejście z antyferromagnetycznego stanu $\uparrow\downarrow\uparrow$ do stanu ferromagnetycznego $\uparrow\uparrow\uparrow$ w zgodzie z doświadczeniem przeprowadzonym dla USb₂ [4] (Rys. 5a).

Niedawne eksperymenty [37, 38] wykazały obecność dwóch podukładów orbitali f o różnym charakterze mieszania się z pasmami przewodnictwa co sugeruje poprawność zaproponowanej przeze mnie interpretacji porządku magnetycznego w USb₂ bazującej na orbitalnej selektywności. Z drugiej strony niedawny eksperyment pokazał, iż przejście fazowe z antyferromagnetyzmu do ferromagnetyzmu w USb₂ ma charakter strukturalny [43] w przeciwieństwie do mechanizmu zaproponowanego przeze mnie.

Indywidualny wkład:

Praca [p3] jest w całości wykonana przeze mnie.

Aktywność konferencyjna dotycząca wyników pracy [p3]:

- We wrześniu 2018, na konferencji “From Spins to Cooper Pairs: Fundamental Aspects of Superconductivity” (Zakopane) **na zaproszenie organizatora** (J. Spałek) wygłosiłem wykład zatytułowany “Mechanisms of phase transitions between ferro- and antiferro- magnetic orderings in itinerant d and f electron materials”

[zob. <http://th-www.if.uj.edu.pl/ztms/pl/conference2018/speakers.php>]

[p4] Przemiany fazowe w topologicznym izolatorze Kondo przy uwzględnieniu nielokalnych efektów korelacji

- Analiza wpływu nielokalnych efektów korelacji na stan topologicznego izolatora Kondo. Otrzymano diagram fazowy, który zawiera przejścia między fazami o różnej topologii jak i między izolatorem a metalem.
- Nielocalne efekty korelacyjne są odpowiedzialne za pojawienie się przerwy w topologicznym izolatorze Kondo z bezdyspersyjnymi stanami f .

Począwszy od odkrycia kwantowego zjawiska Halla [44] i innych zjawisk topologicznych stało się jasne, że konieczne jest rozszerzenie aparatu analizy przemian fazowych o pojęcie porządku topologicznego. Jednym z szerzej opisywanych układów w tym kontekście są izolatory topologiczne [1]. Są to układy, w których objętość próbki jest izolatorem (posiada przerwę pasmową) podczas gdy na brzegach pojawiają się stany, których istnienie zagwarantowane jest przez topologię struktury pasmowej. Nietrywialna topologia w materiałach zazwyczaj związana jest z obecnością relatywistycznych efektów jak np. silne sprzężenie spin-orbita.

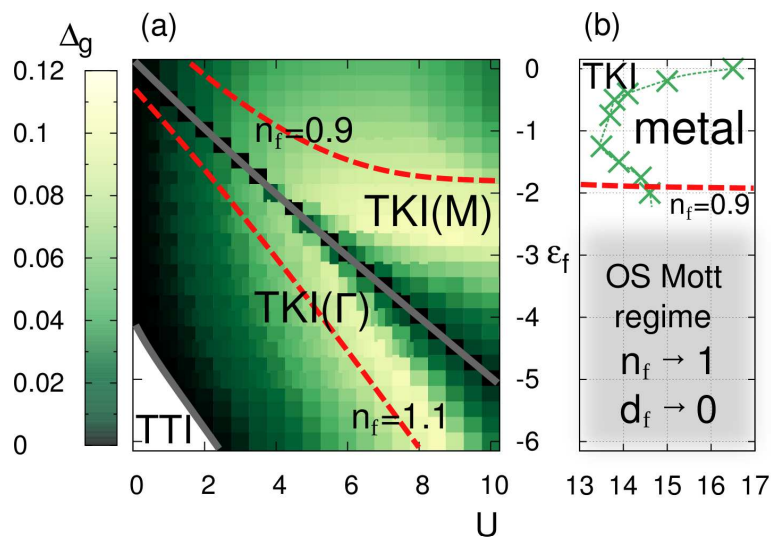
Jednym z ciekawszych materiałów, którego potencjalnie właściwości topologiczne zelektryzowały środowisko fizyki materii skondensowanej jest SmB_6 [45]. Związek ten jest jednym z pierwszych poznanych izolatorów Kondo - półprzewodników z wąską przerwą powstałą na skutek hybrydyzacji zlokalizowanych silnie skorelowanych stanów na orbitalach f ze stanami pasmowymi [45]. Fizyka stojąca za tą klasą materiałów jest niezwykle bogata i pomimo przeszło 50-letniej historii badań jest ciągle bardzo aktualna. Stan topologicznego izolatora Kondo potencjalnie realizowanego przez SmB_6 , został zaproponowany stosunkowo niedawno [46]. Stan ten pojawia się w obecności silnego sprzężenia spinowo-orbitalnego prowadzącego do inwersji pasm o przeciwnej parzystości. Jednakże jak zauważyliśmy w pracy [p4] istnieje pewna luka w rozumowaniu pozwalającym na próbę połączenia materiału SmB_6 ze stanem topologicznego izolatora Kondo. Z powodu znacznej separacji przestrzennej atomów Sm bezpośrednia całka przeskoaku między sąsiednimi orbitalami f jest zerowa. Z drugiej strony hybrydyzacja z powodu narzuconych symetrii znika dla pędów niezmienniczych względem odwrócenia w czasie. Te dwie właściwości przy zaniedbaniu nielokalnych efektów oddziaływań, niezależnie od innych parametrów struktury pasmowej ani liczby pasm wziętych pod uwagę, prowadzą do zerowej przerwy. Aby otworzyć przerwę najczęstszym procederem jest dotychczas niezracjonalizowane założenie dyspersji stanów f . W pracy [p4] pokazaliśmy, iż to powszechnie stosowane założenie ma mikroskopowe uzasadnienie. Mianowicie, pokazaliśmy, iż nielocalne efekty korelacji mogą generować efektywną dyspersję stanów f prowadzącą do otwarcia przerwy.

Minimalnym modelem opisującym inwersję pasm w układzie f -elektronowym jest topologiczny model sieci Andersona (tALM), dla prostoty poniżej zdefiniowany na sieci kwadratowej

$$\mathcal{H}_{tALM} = \sum_{\mathbf{i}} \epsilon_f f_{\mathbf{i}}^{\dagger} f_{\mathbf{i}} + U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}\uparrow}^f n_{\mathbf{i}\downarrow}^f + \sum_{\mathbf{ij}} t_{\mathbf{ij}} c_{\mathbf{i}}^{\dagger} c_{\mathbf{j}} + \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle, \alpha=x,y} [iV(f_{\mathbf{i}}^{\dagger} \sigma_{\alpha} c_{\mathbf{j}} + c_{\mathbf{i}}^{\dagger} \sigma_{\alpha} f_{\mathbf{j}}) + \text{H.c.}] \quad (17)$$

gdzie dwu-komponentowe spinory, $f_{\mathbf{i}}^{\dagger} \equiv (f_{\mathbf{i}\uparrow}^{\dagger}, f_{\mathbf{i}\downarrow}^{\dagger})$ i $c_{\mathbf{i}}^{\dagger} \equiv (c_{\mathbf{i}\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{i}\downarrow}^{\dagger})$ opisują odpowiednio zlokalizowane stany f -orbitalne jak i pasmowe elektrony, $\sigma_{(\alpha=x,y)}$ są macierzami Pauli'ego a $\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle_{\alpha}$ są parą najbliższych sąsiadujących węzłów sieci w kierunku $\alpha = x, y$. Przy zaniedbaniu oddziaływań powyższy model jest tożsamy z tym zaproponowanym przez Bernevig, Hughesa i Zhanga dla studni kwantowych HgTe [47]. Cechą charakterystyczną większości układów f -elektronowych (w tym również SmB_6) uwzględnionym przez model (17) jest brak bezpośredniej całki przeskoaku pomiędzy najbliższymi sąsiadami (ϵ_f nie zależy od pędu). Jak zostało opisane w poprzednim akapicie, stanowi to problem w opisie stanu izolatora jako takiego, czyli otwarcia się przerwy, gdy następuje inwersja pasm o przeciwnej parzystości.

Zaproponowaliśmy, iż efektywna bezpośrednia pasmowość (dyspersja) stanów f -elektronowych może zostać wygenerowana przez nielocalne efekty korelacji objawiające się poprzez zależność ener-



Rysunek 6: (a,b) Diagram fazowy na płaszczyźnie oddziaływania U i poziomu atomowego stanów f ϵ_f modelu (17) ze skalą koloru w (a) oznaczającego wielkość przerwy w jednostkach bezpośredniej całki przeskoku w paśmie przewodnictwa. Diagram zawiera dwie fazy topologicznego izolatora Kondo (TKI), fazę trywialnego izolatora (TTI) jak i fazę metalu. Granica modelu w której pasmo f jest w połowie wypełnione przy znikającej liczbie podwójnych obsadzeń jest oznaczone jako orbitalnie selektywna (OS) granica Motta.

gii własnej, $\Sigma_k(\omega)$ od pędu [porównaj z (7)]. Aby zaprezentować naszą ideę uogólniliśmy metodę DE-GWF do układów ze spinowo zależną hybrydyzacją. Rozwiązanie topologicznego modelu sieci Andersona tą metodą pozwoliło na potwierdzenie naszych przypuszczeń. Mianowicie znaleźliśmy szeroki zakres parametrów, w których nielokalne efekty korelacji rzeczywiście prowadzą do otwarcia się przerwy (porównaj z Rys. 6a). Okazuje się również, iż efektywna dyspersja f elektronów indukowana nielokalnymi korelacjami może również prowadzić do zamknięcia się przerwy. W ten sposób otrzymaliśmy interesujący wynik pokazujący istnienie przejścia izolator-metal indukowanego rosnącymi oddziaływaniami (Rys. 6b).

Indywidualny wkład:

W pracy [p4] uogólniłem metodę DE-GWF do układów ze spinowo zależną hybrydyzacją, wykonałem wszystkie obliczenia numeryczne jak i byłem głównym autorem interpretacji jak i tekstu publikacji.

Aktywność konferencyjna dotycząca wyników pracy [p4]:

- W czerwcu 2017, na konferencji “Superstripes 2017” (Rome International Center for Materials Science of Superstripes, Ischia, Włochy) **na zaproszenie organizatora** (A. Bianconi) wygłosiłem wykład zatytułowany “Topological Kondo semimetals” [zob. <https://www.superstripes.net/superstripes-2017/confirmed-invited-speakers?start=2>]
- W lipcu 2016, na konferencji “Condensed Matter in the City” (Royal Holloway University of London, Wielka Brytania) wygłosiłem wykład zatytułowany “Correlation driven failed topological Kondo insulators”
- W październiku 2016, na konferencji “The New Generation in Strongly Correlated Electron Systems” (International Center for Theoretical Physics, Triest, Włochy) wygłosiłem wykład zatytułowany “Many-body breakdown of the indirect gap in topological Kondo insulators”

[p5] Numerycznie efektywna metoda wariacyjna do opisu przejścia Motta

- Zaproponowanie nowej wielociałowej metody pozwalającej na wariacyjny opis przejścia Motta za pomocą minimalizacji analitycznego funkcjonału energii zależnego jedynie od dwóch parametrów.
- Metoda przetestowana na nieskończenie skoordynowanej sieci Bethego ma dokładność porównywalną z numerycznie dokładnym wynikiem.

Lokalizacja ładunkowych stopni swobody indukowanych rosnącymi oddziaływaniami jest nazywana przejściem metal-izolator Motta. Zjawisko to jest jednym z kluczowych zagadnień fizyki układów silnie skorelowanych fermionów. Wynika to między innymi z szeregu eksperymentów sugerujących ścisły związek tego stanu z występowaniem niekonwencjonalnego nadprzewodnictwa na diagramie fazowym różnych związków chemicznych. Ilościowe badania przejścia Motta rozpoczęły się jednakże dopiero wraz z rozpoznaniem nietrywialnej granicy nieskończonej liczby wymiarów [24]. Dało to podwaliny pod popularną metodę DMFT [10]. Rozwiązanie tą metodą modelu Hubbarda pozwoliło na bardzo dokładną analizę charakteru tego przejścia. Numeryczna złożoność metody pozwala na wygodne badania wielu skorelowanych problemów choć ściśle ujmując jedynie w dość nierealistycznej granicy nieskończonej liczby wymiarów. Diagramatyczne rozwinięcia metody DMFT potrafiące uwzględnić nielocalne efekty korelacji silnie manifestujące się w 2 i 3 wymiarach są niestety numerycznie dużo bardziej wymagające [26]. Z tego powodu jest konieczność rozwijania nowych metod numerycznych o mniejszej złożoności numerycznej pozwalających na osiągnięcie w nieskończonej liczbie wymiarów dokładności porównywalnej z DMFT. Wtedy ewentualne rozszerzenia do skończonej liczby wymiarów mogą być bardzo obiecujące w kontekście stosunkowo niskich wymagań obliczeniowych.

W pracy [p5] zaproponowaliśmy nową wariacyjną funkcję falową będącą kombinacją funkcji falowej Gutzwillera (8) ze sparametryzowaną transformacją kanoniczną (często zwaną również transformacją Schrieffera-Wolffa),

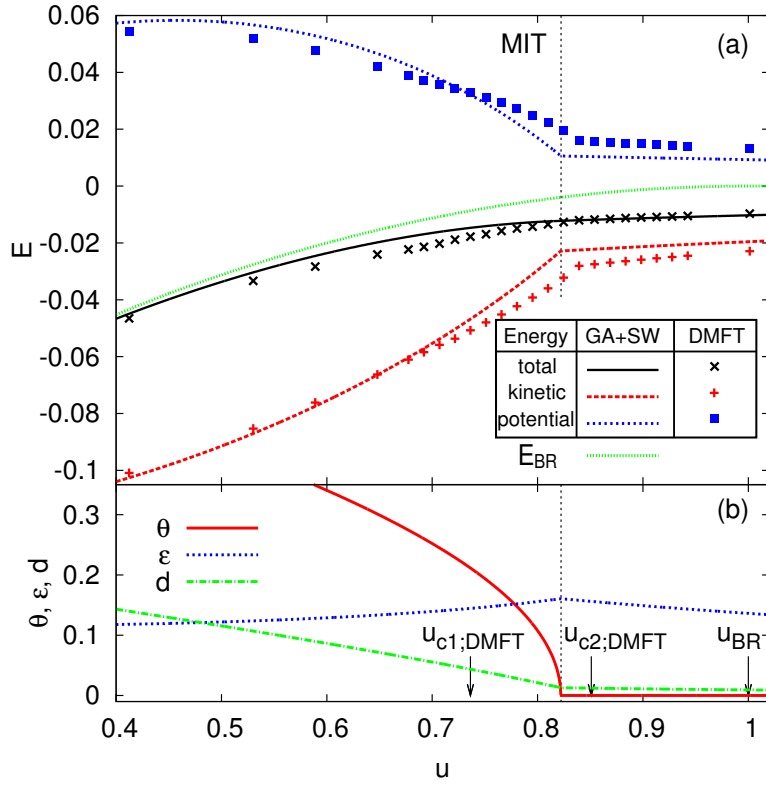
$$|\Psi\rangle = \mathcal{U}(\epsilon) |\psi_G\rangle \quad (18)$$

gdzie funkcja Gutzwillera dla półwypełnionego pasma może zostać skonstruowana z wyznacznika Slatera, $|\psi_0\rangle$ jako $|\psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{i}} \sqrt{2} [\sin \theta \mathcal{P}_{\mathbf{i},0} + \cos \theta \mathcal{P}_{\mathbf{i},1} + \sin \theta \mathcal{P}_{\mathbf{i},2}] |\psi_0\rangle$,

$$\mathcal{U}(\epsilon) = \exp \left(\epsilon \sum_{\langle \mathbf{ij} \rangle} (\mathcal{P}_{20} T_{\mathbf{ij}} \mathcal{P}_{11} - \mathcal{P}_{11} T_{\mathbf{ij}} \mathcal{P}_{20}) \right), \quad (19)$$

$\mathcal{P}_{nm} \equiv \mathcal{P}_{\mathbf{i};n} \mathcal{P}_{\mathbf{j};m} + (1 - \delta_{nm}) \mathcal{P}_{\mathbf{i};m} \mathcal{P}_{\mathbf{j};n}$, δ_{nm} jest deltą Kroneckera, $\mathcal{P}_{\mathbf{i};n}$ jest operatorem rzutowym na węzeł \mathbf{i} i konfigurację z $n \in \{0, 1, 2\}$ fermionami, a $T_{\mathbf{ij}} = \sum_{\sigma} (c_{\mathbf{i}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{j}\sigma} + c_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{i}\sigma})$. Dla $\epsilon = t/U$ transformacja \mathcal{U} zastosowana do modelu Hubbarda redukuje się do tej prowadzącej do modelu t - J [8]. Podczas gdy funkcja falowa Gutzwillera bierze pod uwagę niskoenergetyczne fluktuacje kwantowe prowadzące do kwazicząstkowego opisu, transformacja $\mathcal{U}(\epsilon)$ uwzględnia wysokoenergetyczne fluktuacje kwantowe będące źródłem wymiennego oddziaływania spinowego.

Strategia obliczeń z funkcją falową (18) jest taka, iż wyznacza się analityczną postać wartości oczekiwanej z Hamiltonianu ignorując wyrazy wyższego rzędu od wcześniej wybranego rzędu rozwinięcia w ϵ . Tak otrzymaną energię minimalizuje się ze względu na dwa parametry wariacyjne, ϵ i współczynnik Gutzwillera θ , a następnie należy sprawdzić czy stabilna wartość ϵ jest wystarczająco mała, iż zaniedbanie wyrazów wyższego rzędu w ϵ jest uzasadnione. W pracy [p5] pokazaliśmy, iż uwzględnienie wyrazów do 3 rzędu i zaniedbanie wyższych, $\mathcal{O}(\epsilon^4)$ dla nieskończonej skoordynowanej sieci Bethego (gdzie przybliżenie Gutzwillera staje się wariacyjnie dokładne) prowadzi do pożądanego zbieżności. W efekcie minimalizując prosty, dwu wymiarowy analityczny funkcjonał opisaliśmy



Rysunek 7: (a) Równowagowy bilans energii wokół przejścia metal - izolator Motta wynikający z rozwiązania modelu Hubbard'a na nieskończenie skoordynowanej sieci Bethego przy wykorzystaniu funkcji falowej (18). Dla porównania nanieśliśmy na wykres również punkty dokładnego rozwiązania z obliczeń przy użyciu metody DMFT. Dodatkowo jako punkt odniesienia prezentujemy również energię odpowiadającą wynikowi Brinkmana i Rice'a przy użyciu samej funkcji Gutzwillera (E_{BR}) [48]. (b) Równowagowe wartości parametrów θ (współczynnik Gutzwillera), ϵ (parametr transformacji) i d (wartość oczekiwana z podwójnych obsadzeń) wokół przejścia metal - izolator Motta. Na wykresie zaznaczyliśmy krytyczne wartości oddziaływań dla przejścia Brinkmana–Rice'a (u_{BR}) jak i tych otrzymanych z DMFT: dla $u_{c1;DMFT}$ obydwa, metaliczne i izolujące, rozwiązania zaczynają koegzystować. Podobnie jak DMFT nasza metoda przewiduje niezerową liczbę podwójnych obsadzeń również w fazie izolatora Motta. Użyliśmy tutaj oddziaływania w zredukowanych jednostkach, $u = U/8T_0$, gdzie $T_0 = 8t/3\pi$.

przejście Motta z dokładnością porównywalną z metodą DMFT (porównaj Rys. 7). Dodatkowo opracowana metoda pozwala na bezpośredni wgląd w zachowanie niekoherentnych wysoko-energetycznych fluktuacji kwantowych nawet przed przejściem Motta w stanie skorelowanego metalu.

Indywidualny wkład:

W pracy [p5] wykonałem wszystkie obliczenia analityczne i numeryczne jak i byłem głównym autorem analizy wyników i tekstu publikacji.

Aktywność konferencyjna dotycząca wyników pracy [p5]:

- W październiku 2017, na konferencji "FisMat" (International Center for Theoretical Physics, Trieste, Włochy) wygłosiłem wykład zatytułowany "Variational Schrieffer-Wolff transformation: Mott physics at and far from equilibrium"
- We wrześniu 2018, na konferencji "The New Generation in Strongly Correlated Electron Systems" (Donostia International Physics Center, San Sebastian, Hiszpania) wygłosiłem wykład zatytułowany "Efficient variational approach to strongly correlated fermions at and far from equilibrium"

[p6] Sprzężenie pomiędzy ładunkowymi a spinowymi stopniami swobody w okolicach dynamicznego przejścia Motta

- Opracowanie metody wariacyjnej opisującej unitarną ewolucję w nierównowagowym modelu Hubbarda na bardzo długich skalach czasowych.
- Analiza sprzężenia ładunkowych i spinowych stopni swobody wokół dynamicznego przejścia Motta.
- Sugestia istnienia dynamicznego przejścia typu crossover w spinowym sektorze na skutek nagłej i silnej zmiany oddziaływania.

W ostatnim czasie eksperymenty spektroskopowe zależne od czasu (między innymi typu *pump and probe*) mają coraz większe znaczenie w badaniu i kontroli materiałów silnie skorelowanych fermionów [49]. Dają one dostęp do nowych informacji na temat dynamicznych właściwości tych układów poza możliwościami konwencjonalnej czasowo-niezależnej spektroskopii, np. na temat przejść fazowych na ultrakrótkich skalach czasowych. Obecne nierównowagowe badania skorelowanych fermionów skupiają się głównie wokół trzech trendów: (i) spektroskopii rozdzielczej w czasie będącej selektywną sondą dla konkretnych stopni swobody (np. [50]); (ii) nierównowagowego selektywnego wzmocnienia konkretnych uporządkowań lub realizacji długo żyjących metastabilnych stanów (np. [51]); (iii) dynamicznego indukowania egzotycznych oddziaływań w ramach inżynierii Floqueta w periodycznie wzbudzanych układach (np. [13]). Techniki i rozważane problemy mierzą się jednakże z krytycznymi wyzwaniami, takimi jak rozwój zarówno aparatu do dokładnych pomiarów eksperymentalnych jak i efektywnych numerycznych metod opisu czasowej ewolucji układów.

W kontekście ogólnych rozważań teoretycznych bardzo interesującym problemem okazało się badanie nierównowagowego (z zależną od czasu amplitudą oddziaływania) modelu Hubbarda,

$$\mathcal{H}(t) = V \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U(t) \sum_{\mathbf{i}} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (20)$$

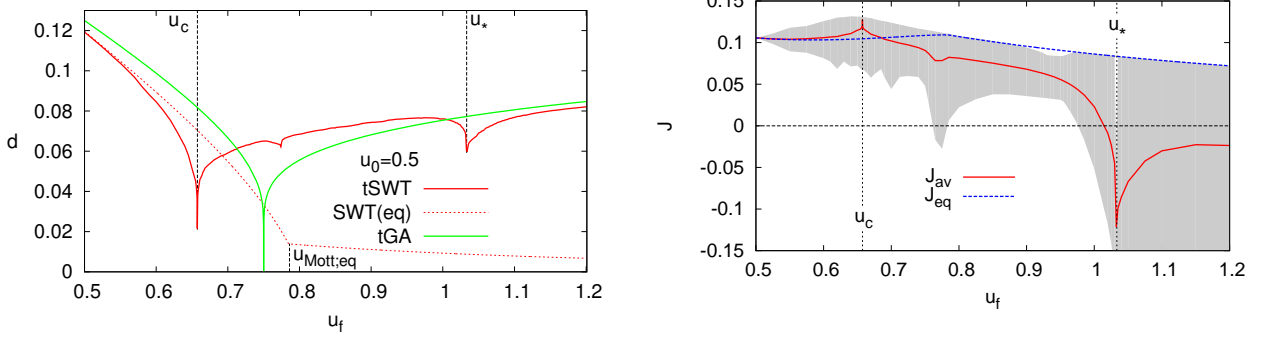
Początkowo zadaniem pytaniem w pionierskiej pracy [14] było to o charakter unitarnej ewolucji w tym modelu jeżeli wielkość oddziaływania z początkowej $U_0 = 0$ zostanie gwałtownie zwiększona do końcowej $U_f > 0$. Autorzy za pomocą metody dynamicznego pola średniego uogólnionego do czasowej domeny, znaleźli istnienie ostrej zmiany charakterystyk (np. liczby podwójnych obsadzeń) dla pewnej krytycznej wartości U_f . Zjawisko to, pomimo możliwości symulowania jedynie krótkich czasów ewolucji, posiada znamiona dynamicznego przejścia fazowego. Ta obserwacja sugeruje brak termalizacji modelu, gdyż możliwa temperatura osiągnięta na skutek gwałtownego dostarczenia energii do układu jest dużo wyższa niż krytyczny punkt końcowy przejścia Motta w równowadze na diagramie temperatura vs oddziaływanie [10]. Jednakże, późniejsze badania prostszą metodą [52], biorącą pod uwagę tylko ładunkowe stopnie swobody, zasugerowały, iż przejście jest adiabaticznie połączone z równowagowym przejściem Motta [53]. Stanowi to istotny argument, że odkryta anomalia [14] jest prawdziwym dynamicznym przejściem fazowym.

W pracy [p6] postanowiliśmy pogłębić wiedzę na temat tego zjawiska. W tym celu rozszerzyliśmy funkcję wariacyjną opracowaną w pracy [p5] do sytuacji nierównowagowej,

$$|\Psi(t)\rangle = \mathcal{U}(\epsilon(t), \epsilon^*(t)) |\psi_G(t)\rangle \quad (21)$$

gdzie $|\psi_G(t)\rangle$ jest czasowo zależną funkcją falową Gutzwillera [52] i

$$\mathcal{U}(\epsilon(t), \epsilon^*(t)) = \exp \left(\sum_{\langle ij \rangle} (\epsilon(t) P_{20} T_{ij} P_{11} - \epsilon^*(t) P_{11} T_{ij} P_{20}) \right), \quad (22)$$



Rysunek 8: (Lewy panel) Średnia liczba podwójnych obsadzeń po gwałtownej zmianie oddziaływania z $u_0 = 0.5$ do u_f dla $|\Psi(t)\rangle$ (czerwona ciągła linia) i dla porównania dla $|\psi_G(t)\rangle$ (zielona ciągła linia). Równowagowa liczba podwójnych obsadzeń otrzymana z pomocą $|\Psi(t)\rangle$ wraz z przejściem Motta w $u_{Mott,eq}$ jest zaznaczona przerywaną czerwoną linią. (Prawy panel) Średnia amplituda oddziaływania spinowego (J_{av} , czerwona ciągła linia) razem z zakresem fluktuacji w czasie zaznaczonym na szaro. Dla porównania zaznaczona jest również równowagowa wartość oddziaływania spinowego (J_{eq} , niebieska przerywana linia).

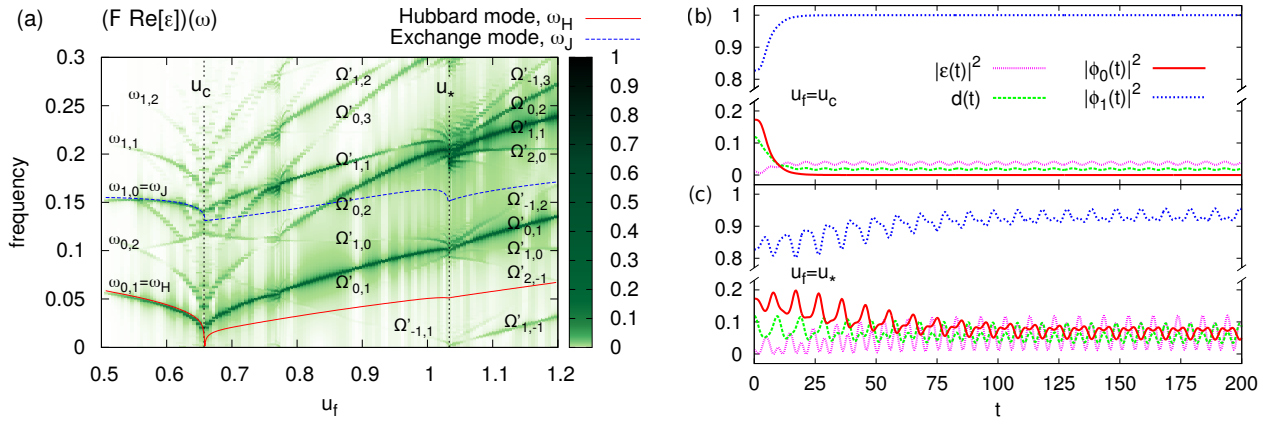
$T_{ij} = \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma})$. Dynamika modelu jest określona przez punkt siodłowy działania

$$S = \int dt \langle \Psi(t) | i \frac{d}{dt} - \mathcal{H}(t) | \Psi(t) \rangle. \quad (23)$$

Tutaj zasada wariacyjna rozszerzona do czasowej domeny mówi, iż chcemy aby dla każdego momentu czasu wariacyjna funkcja falowa była jak najbliżej prawdziwego rozwiązania. W konsekwencji należy rozwiązać równania Eulera-Lagrangea dla parametrów wariacyjnych ϵ i tych definiujących funkcję falową Gutzwillera.

Opracowana metoda, dzięki relatywnie małej złożoności numerycznej, pozwoliła na zbadanie unitarnej ewolucji po gwałtownej zmianie oddziaływania w modelu Hubbarda na praktycznie arbitralnie długiej skali czasowej przy przejrzystym uwzględnieniu dynamiki zarówno ładunkowych (kontrolowanych przez dynamikę współczynników Gutzwillera) jak i spinowych (kontrolowanych przez dynamikę ϵ) stopni swobody. Podobnie jak to pokazała czasowo zależna metoda dynamicznego pola średniego dla pewnej krytycznej wartości końcowej oddziaływania ($u_f = u_c$) otrzymaliśmy dynamiczne przejście Motta, kiedy układ bardzo szybko relaksuje do metastabilnego stanu charakteryzującego się bardzo ograniczoną średnią liczbą podwójnych obsadzeń (zobacz czerwoną nieprzerywaną linię na lewym panelu Rys. 8). Użyliśmy tutaj zredukowanych jednostek, $u = U/8T_0$ i $\tau = V/8T_0$, gdzie $T_0 = 8V/3\pi$. Nasza metoda dodatkowo pozwoliła na analizę wartości spinowego oddziaływania wymiennego, którego wartość średnią przedstawia prawy panel Rys. 8. Dokładnie dla wartości końcowego oddziaływania $u_f = u_c$ oscylacje całkowicie zanikają a wartość oddziaływania spinowego wynosi $J_c = 4\tau^2/u_c$, gdzie τ jest odpowiednio przeskalowaną całką przeskoku do tych samych jednostek, w których określone jest u_c . Jest to zaskakujący wynik gdyż taką formę funkcijną w zależności od wartości oddziaływania u ma izolator Motta w równowadze. Otrzymany wynik wskazuje, iż metastabilny stan osiągnięty po szybkiej relaksacji dla końcowej wartości oddziaływania u_c ma znamiona równowagowego stanu izolatora Motta, który jednakże osiągalny jest dla mniejszej wartości oddziaływań.

Dość nieoczekiwanie, dla bardzo dużych wartości końcowego oddziaływania (w otoczeniu u_*) otrzymaliśmy charakterystyki dotyczące średniej liczby podwójnych obsadzeń (zobacz lewy panel Rys. 8) bardzo przypominające dynamiczne przejście Motta. Na wykresie średniej wartości oddziaływania spinowego (prawy panel rys. 8) widać, że u_* jest poprzedzony przez dość gwałtowną zmianę znaku J_{av} z antyferromagnetycznego na ferromagnetyczny sugerując silny związek przejścia ze spinowymi stopniami swobody. W celu zbadania natury dynamicznego przejścia dla u_* przeprowadziliśmy



Rysunek 9: (a) Spektrum części rzeczywistej parametru ϵ względem końcowego oddziaływania u_f . Zaznaczone częstości mają następującą strukturę, $\omega_{n,k} = n\omega_J + k\omega_H$ i $\Omega'_{n,k} = n(\omega_J - \omega_H) + 2k\omega_H$. Ewolucja w czasie parametrów wariacyjnych Gutzwillera $\phi_{\{1,0\}}(t)$, parametru $\epsilon(t)$ jak i liczby podwójnych obsadzeń $d(t)$ dla (b) dynamicznego przejścia Motta w $u_f = u_c$ i (c) dynamicznego przejścia typu crossover w $u_f = u_*$.

analizę Fouriera dynamiki parametru ϵ (zobacz Rys. 9a). Dla dynamicznego przejścia Motta w u_c większość modów staje się miękka zmieniając charakter prawdziwego przejścia fazowego. Okazuje się, iż również przejściu w u_* towarzyszy miękki mod. Dodatkowo dynamika parametrów wariacyjnych jak i podwójnych obsadzeń charakteryzuje się podobną relaksacją zarówno dla dynamicznego przejścia Motta (zobacz Rys. 9b) jak i przejścia w u_* (zobacz Rys. 9c). Pomimo tych podobieństw dokładna analiza struktury modów wykazała, iż anomalie w u_* nie mają źródła w jednym modzie a są spowodowane przecięciem dwóch różnych modów, $\Omega'_{-1,1}$ i $\Omega'_{1,-1}$ (Rys. 9a) w zerze. Z tego powodu anomalia w *postquenchowej* dynamice układu w u_* została scharakteryzowana jako dynamiczne przejście typu crossover, powiązane z gwałtowną zmianą wartości i znaku oddziaływania spinowego.

Indywidualny wkład:

W pracy [p6] wykonałem wszystkie obliczenia analityczne i numeryczne jak i byłem głównym autorem analizy wyników i tekstu publikacji.

Aktywność konferencyjna dotycząca wyników pracy [p6]:

- We wrześniu 2019, na konferencji “45 Zjazd Fizyków Polskich” w Krakowie **na zaproszenie organizatora** (J. Spałek) wygłosiłem wykład zatytułowany “Correlated fermions out-of-equilibrium”.
- W październiku 2017, na konferencji “FisMat” (International Center for Theoretical Physics, Triest, Włochy) wygłosiłem wykład zatytułowany “Variational Schrieffer-Wolff transformation: Mott physics at and out of equilibrium”
- We wrześniu 2018, na konferencji “The New Generation in Strongly Correlated Electron Systems” (Donostia International Physics Center, San Sebastian, Hiszpania) wygłosiłem wykład zatytułowany “Efficient variational approach to strongly correlated fermions at and far from equilibrium”

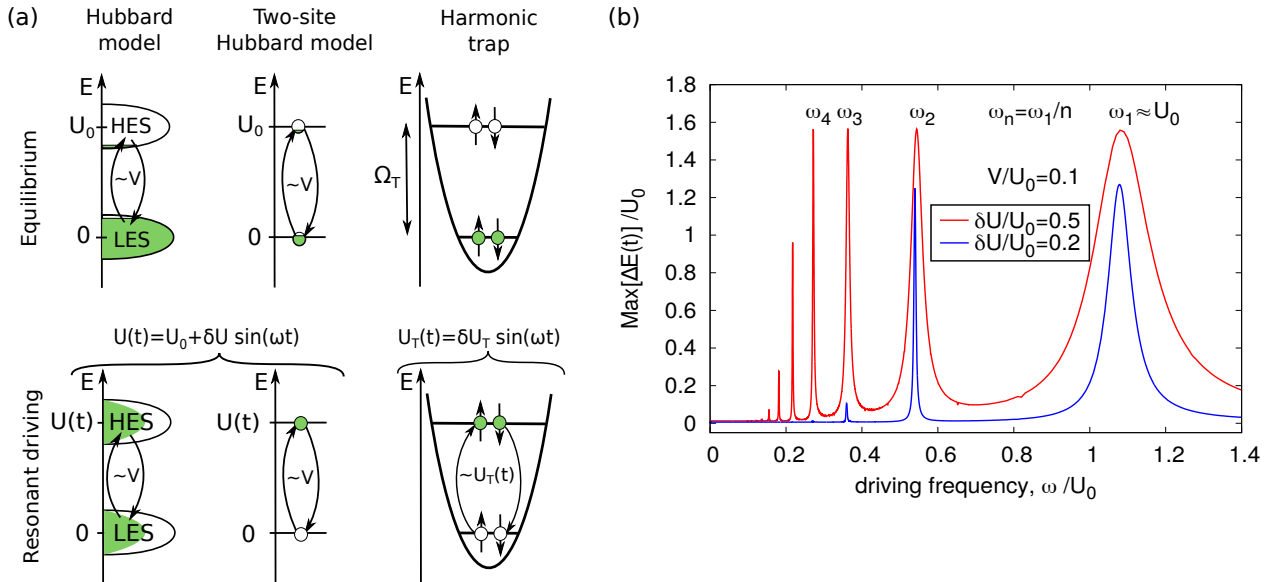
[p7] Wyjaśnienie zjawiska rezonansowej absorpcji energii przez periodycznie wzbudzany izolator Motta

- Periodyczna modulacja oddziaływania w izolatorze Motta sprzęga pasma Hubbarda w podobny sposób jak klasyczne pole dwu-poziomowy atom.
- Mechanizm prowadzący do rezonansowej absorpcji energii występuje już w dimerze Hubbarda i ma wielofotonową naturę.

Większość problemów nierównowagowych, dotyczących układów ze zmiennymi w czasie mikroskopowymi parametrami, wymaga złożonych obliczeń numerycznych pozwalających dokładnie śledzić charakterystyki takie jak np. energia całkowita. Zagadnienie nieco się upraszcza, gdy układy są modulowane periodycznie. W tych przypadkach z pomocą przychodzi perturbacyjne podejście bazujące na teorii Floqueta. Mianowicie dla periodycznie modulowanych układów nieuniknione grzanie jest powstrzymane na stosunkowo długiej skali czasowej, na której układ jest opisywalny przez czasowo-niezależny model efektywny [16, 17]. Poprawność takiego opisu została potwierdzona w eksperymentach na zimnych gazach atomowych w sieciach optycznych [12, 54]. Jednakże istnieją pewne charakterystyczne częstości modulowania, dla których następuje szybka absorpcja energii a podejście perturbacyjne bazujące na teorii Floqueta się załamuje.

W pracy [15] odkryto, iż nierównowagowy model Hubbarda [model w równaniu (20)] na nieskończenie wymiarowej sieci z periodycznie modulowaną wartością oddziaływania, $U(t) = U_0 + \delta U \sin \omega t$ przejawia rezonansową absorpcję energii dla częstości modulacji w przybliżeniu będących podwielokrotnościami wartości średniej amplitudy oddziaływania, $\omega_R \simeq U_0/n$ gdzie $n \in \mathbb{Z}$. Jednakże, w pracy [15] zabrakło precyzyjnego zrozumienia mikroskopowego mechanizmu prowadzącego do zaobserwowanego w symulacji zjawiska. W celu lepszego zrozumienia tego problemu w pracy [p7] zbadaliśmy naturę zjawiska gwałtownej absorpcji energii w izolatorze Motta.

Za pomocą równowagowej teorii zaburzeń względem małego parametru V/U_0 otrzymaliśmy następującą strukturę modelu w wysokoenergetycznej (z podwójnymi obsadzeniami) i niskoenergetycznej



Rysunek 10: (a) Schematyczna wizualizacja skali energii w modelu Hubbarda, dwu-węzłowym modelu Hubbarda i w dwu poziomowej pułapce harmoniczej. (b) Maksymalna energia zaabsorbowana przez dimer Hubbarda w czasie $tU_0 < 500$ względem częstości modulacji oddziaływania ω dla $V/U_0 = 0.1$ i dwóch wartości amplitudy modulacji $\delta U/U_0 = \{0.5, 0.2\}$.

(bez podwójnych obsadzeń) podprzestrzeni,

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \frac{V^2}{U_0} \left(1 - \frac{\delta U \sin \omega t}{U_0}\right) \sum_{\langle ij \rangle} \mathbb{J}_{ij}^H & \frac{V \delta U}{U_0} \sin \omega t \sum_{\langle ij \rangle} \tilde{T}_{ij} \\ \frac{V \delta U}{U_0} \sin \omega t \sum_{\langle ij \rangle} \tilde{T}_{ij}^\dagger & \frac{V^2}{U_0} \left(\frac{\delta U \sin \omega t}{U_0} - 1\right) \sum_{\langle ij \rangle} \mathbb{J}_{ij}^L \end{pmatrix}, \quad (24)$$

gdzie $\mathbb{J}_{ij}^L \equiv P_{11} T_{ij}^2 P_{11} \simeq -4\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, $\mathbb{J}_{ij}^H \equiv P_{20} T_{ij}^2 P_{20}$ i $T_{ij} = \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma})$. Indeksy L i H odnoszą się odpowiednio do niskoenergetycznej (*low-energy*) i wysokoenergetycznej (*high-energy*) podprzestrzeni. Otrzymana perturbacyjna struktura modelu w tychże podprzestrzeniach sugeruje, iż modulacja oddziaływania sprzęga pasma Hubbarda podobnie jak klasyczne pole elektryczne o poprzecznej i podłużnej składowej sprzęga się do stanów dwupoziomowego atomu (porównaj z Rys.10a). Ta druga sytuacja jest dość dobrze znana w kwantowej optyce i opisana jest przez model Rabiiego,

$$H_R = \frac{1}{2} (\Omega_0 + \Omega_z \sin \omega t) \sigma_z + \Omega_x \sin \omega t \sigma_x, \quad (25)$$

gdzie $\sigma_{x,y,z}$ są macierzami Pauliego, Ω_0 jest różnicą energii między poziomami atomu, a Ω_x i Ω_z są odpowiednio poprzecznymi i podłużnymi składowymi klasycznego pola. Dodatkowo w pracy [p7] wykazaliśmy równowagę między modelem Rabiiego a rozważanym nierównowagowym modelem Hubbarda na dwóch węzłach z następującą parametryzacją $\Omega_0 = -\sqrt{U_0^2 + 16V^2}$, $\Omega_z = \frac{\delta U U_0}{\Omega_0}$, $\Omega_x = -\frac{2\delta U V}{\Omega_0}$. Na podobieństwo pomiędzy periodycznie wzbudzonym izolatorze Motta i dwupoziomowym atomem sprzężonym z klasycznym polem wskazuje fakt, iż jak pokazaliśmy nierównowagowy dimer Hubbarda jest równoważny z modelem Rabiiego, i prowadzi do praktycznie takiego samego rezonansowego zachowania dla częstości $\omega_R \simeq U_0/n$ gdzie $n \in \mathbb{Z}$ (Rys. 10)b) jak to ma miejsce w przypadku izolatora Motta [15]. W celu dokładniejszej interpretacji natury rezonansów w wzbudzonym izolatorze Motta w następnej kolejności skupiliśmy się na analizie dimeru Hubbarda (materiały dodatkowe w pracy [p7]) w ramach popularnego przybliżenia *Rotating Wave Approximation* (RWA).

Przybliżenie RWA dla modelu Rabiiego jedynie z polem poprzecznym przewiduje rezonansowe zachowanie gdy częstość ω jest zsynchronizowana z Ω_0 co prowadzi do obsadzenia wysoko-energetycznego poziomu (HEL - *high energy level*) zgodnie z prawdopodobieństwem

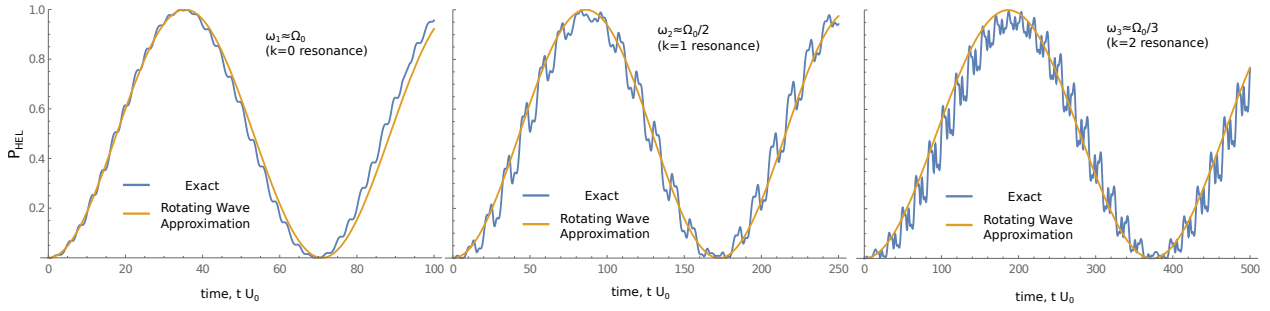
$$P_{HEL}(t) = \sin^2(\Omega_R t/2) \quad (26)$$

gdzie $\Omega_R = \Omega_x$ jest częstością Rabiiego. Dla silnego pola $\Omega_x/\Omega_0 > 1$ w rozwiązaniu modelu spodziewane są również, nieuchwytnie w przybliżeniu RWA, wielofotonowe procesy o strukturze $\omega^{(p)} = \Omega_0/(2p + 1)$, gdzie $p \in \{1, 2, 3, \dots\}$. Jednakże, gdy $\Omega_x \ll \Omega_0$, tak jak ma się to w przypadku dimeru Hubbarda, jedynie jednofotonowy ($p = 0$) rezonans manifestuje się na skali czasowej odpowiadającej symulacji z pracy [15].

Z drugiej strony istnienie znacznej amplitudy podłużnej komponenty pola prowadzi do nowych wielofotonowych rezonansów o strukturze $\omega = \Omega_0/(1 + k)$, gdzie ponownie $k \in \{1, 2, 3, \dots\}$ [55, 56]. Zapis $1 + k$ oznacza, iż wielofotonowe rezonanse mają charakter jednofotonowy w polu poprzecznym i jedno, bądź wielofotonowy charakter w polu podłużnym. Znaczna wartość podłużnej komponenty pola w dimerze Hubbarda $\Omega_0 < \Omega_z \ll \Omega_x$ sugeruje jej kluczową rolę w tworzeniu się rezonansów widocznych na Rys. 10b. W przybliżeniu RWA częstość Rabiiego dla jednego fotonu z pola poprzecznego i k -fotonów z pola podłużnego ma postać [55, 56],

$$\Omega_R = |\Omega_x J_k(\Omega_z(k + 1)/\Omega_0)|, \quad (27)$$

gdzie J_k jest funkcją Bessela k -tego rzędu. Na Rysunku 11 pokazaliśmy znakomitą zgodność prawdopodobieństwa P_{HEL} wynikającego ze wspomnianej konkretnej wielofotonowej natury rezonansów z Rysunku 10b z dokładnym numerycznym rozwiązaniem dla trzech kolejnych rezonansów. Nasza pełna analiza problemu stanowi solidne potwierdzenie interpretacji, iż periodycznie modulowane oddziaływanie dla izolatora Mott'a sprzęga pasma Hubbarda jak klasyczne pole z poprzeczną i podłużną komponentą sprzęga poziomy atomu.



Rysunek 11: Numerycznie dokładna i analityczna w przybliżeniu RWA czasowa ewolucja rezonansowego prawdopodobieństwa obsadzenia wysoko-energetycznego poziomu (HEL high-energy level) w dimerze Hubbarda.

Dzięki dogłębniemu zrozumieniu natury rezonansowej absorpcji energii w modelu Hubbarda zaproponowaliśmy inny układ skorelowanych fermionów, w którym można zaobserwować tę samą fizykę. Mianowicie, okazuje się, iż ultra zimne fermiony w jednowymiarowej pułapce harmonicznnej kontaktowo oddziałujące z periodycznie modulowaną amplitudą, również przejawiają wielofotonową absorpcję o tej samej strukturze (Rys. 10a), co zostało udowodnione w dokładnej symulacji numerycznej.

Indywidualny wkład:

Praca [p7] w sposób przejrzysty dzieli się na dwie części: (i) rozważania dotyczące izolatora Motta, dimeru Hubbarda i wielofotonowej natury obserwowanych w tych układach rezonansów i (ii) symulacja kilku fermionów w pułapce harmonicznnej. W tej perspektywie jestem autorem części (i) dotyczącej izolatora Motta i dimeru Hubbarda. Pomysł hipotezy badawczej jest wynikiem wspólnej dyskusji. Byłem również głównym autorem tekstu publikacji za wyjątkiem części dotyczącej kilku fermionów w pułapce harmonicznnej.

Aktywność konferencyjna dotycząca wyników pracy [p7]:

- We wrześniu 2019, na konferencji “45 Zjazd Fizyków Polskich” w Krakowie na zaproszenie organizatora (J. Spałek) wygłosiłem wykład zatytułowany “Correlated fermions out-of-equilibrium”.

4.3.5 Podsumowanie

W cyklu prac [p1-p7] składających się na osiągnięcie naukowe, rozważałem równowagowe i nierównowagowe właściwości układów skorelowanych fermionów. Szczególny nacisk został położony na badanie równowagowych faz o złamanej symetrii i przejść pomiędzy nimi [p1-p5] jak i nierównowagowych zjawisk prowadzących do ostrych zmian charakteru ewolucji układu takich jak dynamiczne przejście fazowe, przejście typu crossover czy rezonansów wielofotonowych [p6-p7]. Z jednej strony w części prac kluczowym osiągnięciem było rozwinięcie bądź opracowanie nowej metody numerycznej do badania danego typu zjawisk [p4-p6]. Z drugiej strony w innej części prac skupiłem się raczej na dogłębnej analizie mikroskopowych mechanizmów prowadzących do pojawienia się magnetyzmu [p1-p3] czy rezonansowej absorpcji energii w periodycznie modulowanym izolatorze Motta [p7].

Przedstawione badania teoretyczne mogą przyczynić się do lepszego poznania właściwości bardzo konkretnych materiałów badanych eksperymentalnie. Na tym polu największym moim osiągnięciem jest zaproponowanie mechanizmu przejścia ferromagnetyk-antyferromagnetyk [p1] zaobserwowanego w LaCrGe_3 [3, 28], odkrycie źródła przestrzennej modulacji magnetyzacji w $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ [p2], zaproponowanie orbitalnej selektywności f -elektronów w USb_2 [p3] później niezależnie zaobserwowanej w dwóch eksperymentach [37, 38] jak i wyjaśnienie otwierania się przerwy pasmowej w SmB_6 jeżeli realizuje on stan topologicznego izolatora Kondo [p4].

4.3.6 Bibliografia

- [p1] M. M. Wysokiński, Scientific Reports **9**, 19461 (2019), *Mechanism for transitions between ferromagnetic and antiferromagnetic orders in d-electron metallic magnets*
- [p2] G. Cuono, C. Autieri, M. M. Wysokiński, Physical Review B **104**, 024428 (2021), *Spatially modulated orbital-selective ferromagnetism in $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$*
- [p3] M. M. Wysokiński, Physical Review B: Rapid Communication **97**, 041107 (2018), *Microscopic mechanism for the unusual antiferromagnetic order and the pressure-induced transition to ferromagnetism in USb_2*
- [p4] M. M. Wysokiński, M. Fabrizio, Physical Review B: Rapid Communication **94**, 121102 (2016), *Many-body breakdown of indirect gap in topological Kondo insulators*
- [p5] M. M. Wysokiński, M. Fabrizio, Physical Review B: Rapid Communication **95**, 161106 (2017), *Mott physics beyond the Brinkman-Rice scenario*
- [p6] M. M. Wysokiński, M. Fabrizio, Physical Review B: Rapid Communication **96**, 201115 (2017), *Interplay of charge and spin dynamics after an interaction quench in the Hubbard model*
- [p7] M. Płodzień, M. M. Wysokiński, Physical Review B: Rapid Communication **100**, 041116 (2019), *Rabi-resonant behavior of periodically-driven correlated fermion systems*

Literatura

- [1] M. Z. Hasan and C. L. Kane, “Colloquium: Topological insulators,” Rev. Mod. Phys. **82**, 3045–3067 (2010).
- [2] Markus Heyl, “Dynamical quantum phase transitions: a review,” Reports on Progress in Physics **81**, 054001 (2018).
- [3] V. Taufour, U. S. Kaluarachchi, R. Khasanov, M. C. Nguyen, Z. Guguchia, P. K. Biswas, P. Bonfà, R. De Renzi, X. Lin, S. K. Kim, E. D. Mun, H. Kim, Y. Furukawa, C.-Z. Wang, K.-M. Ho, S. L. Bud’ko, and P. C. Canfield, “Ferromagnetic quantum critical point avoided by the appearance of another magnetic phase in LaCrGe_3 under pressure,” Phys. Rev. Lett. **117**, 037207 (2016).

- [4] J. R. Jeffries, R. L. Stillwell, S. T. Weir, Y. K. Vohra, and N. P. Butch, “Emergent ferromagnetism and t -linear scattering in USb_2 at high pressure,” *Phys. Rev. B* **93**, 184406 (2016).
- [5] Li Xiang, Elena Gati, Sergey L. Bud’ko, Scott M. Saunders, and Paul C. Canfield, “Avoided ferromagnetic quantum critical point in pressurized $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$,” *Phys. Rev. B* **103**, 054419 (2021).
- [6] J. P. F. LeBlanc, Andrey E. Antipov, Federico Becca, Ireneusz W. Bulik, Garnet Kin-Lic Chan, Chia-Min Chung, Youjin Deng, Michel Ferrero, Thomas M. Henderson, Carlos A. Jiménez-Hoyos, E. Kozik, Xuan-Wen Liu, Andrew J. Millis, N. V. Prokof’ev, Mingpu Qin, Gustavo E. Scuseria, Hao Shi, B. V. Svistunov, Luca F. Tocchio, I. S. Tupitsyn, Steven R. White, Shiwei Zhang, Bo-Xiao Zheng, Zhenyue Zhu, and Emanuel Gull (Simons Collaboration on the Many-Electron Problem), “Solutions of the two-dimensional Hubbard model: Benchmarks and results from a wide range of numerical algorithms,” *Phys. Rev. X* **5**, 041041 (2015).
- [7] Hideo Aoki, Naoto Tsuji, Martin Eckstein, Marcus Kollar, Takashi Oka, and Philipp Werner, “Nonequilibrium dynamical mean-field theory and its applications,” *Rev. Mod. Phys.* **86**, 779–837 (2014).
- [8] K. A. Chao, J. Spałek, and A. M. Oleś, “Kinetic exchange interaction in a narrow s-band,” *J. Phys. C* **10**, L271 (1977).
- [9] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, “Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory,” *Rev. Mod. Phys.* **78**, 865–951 (2006).
- [10] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, and Marcelo J. Rozenberg, “Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions,” *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13–125 (1996).
- [11] G. Sordi, P. Sémon, K. Haule, and A.-M. S. Tremblay, “Strong coupling superconductivity, pseudogap, and Mott transition,” *Phys. Rev. Lett.* **108**, 216401 (2012).
- [12] Michael Messer, Kilian Sandholzer, Frederik Görg, Joaquín Minguzzi, Rémi Desbuquois, and Tilman Esslinger, “Floquet dynamics in driven Fermi-Hubbard systems,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 233603 (2018).
- [13] Frederik Görg, Kilian Sandholzer, Joaquín Minguzzi, Remi Desbuquois, Michael Messer, and Tilman Esslinger, “Realization of density-dependent Peierls phases to engineer quantized gauge fields coupled to ultracold matter,” *Nature* **15**, 1161 (2019).
- [14] Martin Eckstein, Marcus Kollar, and Philipp Werner, “Interaction quench in the Hubbard model: Relaxation of the spectral function and the optical conductivity,” *Phys. Rev. B* **81**, 115131 (2010).
- [15] Francesco Peronaci, Marco Schiró, and Olivier Parcollet, “Resonant thermalization of periodically driven strongly correlated electrons,” *Phys. Rev. Lett.* **120**, 197601 (2018).
- [16] Dmitry Abanin, Wojciech De Roeck, Wen Wei Ho, and François Huveneers, “A rigorous theory of many-body prethermalization for periodically driven and closed quantum systems,” *Communications in Mathematical Physics* **354**, 809–827 (2017).
- [17] Marin Bukov, Luca D’Alessio, and Anatoli Polkovnikov, “Universal high-frequency behavior of periodically driven systems: from dynamical stabilization to Floquet engineering,” *Advances in Physics* **64**, 139–226 (2015).

- [18] M. M. Wysokiński, J. Kaczmarczyk, and J. Spałek, “Gutzwiller wave-function solution for Anderson lattice model: Emerging universal regimes of heavy quasiparticle states,” *Phys. Rev. B* **92**, 125135 (2015).
- [19] Marcin M. Wysokiński and Michele Fabrizio, “Many-body breakdown of indirect gap in topological Kondo insulators,” *Phys. Rev. B* **94**, 121102 (2016).
- [20] M. M. Wysokiński, Jan Kaczmarczyk, and J. Spałek, “Correlation-driven d -wave superconductivity in Anderson lattice model: Two gaps,” *Phys. Rev. B* **94**, 024517 (2016).
- [21] M. M. Wysokiński, M. Abram, and J. Spałek, “Ferromagnetism in UGe_2 : A microscopic model,” *Phys. Rev. B* **90**, 081114(R) (2014).
- [22] M. M. Wysokiński, M. Abram, and J. Spałek, “Criticalities in the itinerant ferromagnet UGe_2 ,” *Phys. Rev. B* **91**, 081108(R) (2015).
- [23] M. Abram, M. M. Wysokiński, and J. Spałek, “Tricritical wings in UGe_2 : A microscopic interpretation,” *J. Mag. Mag. Mat.* **400**, 27 – 30 (2016).
- [24] Walter Metzner and Dieter Vollhardt, “Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions,” *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324–327 (1989).
- [25] J. Bünemann, T. Schickling, and F. Gebhard, “Evaluation techniques for Gutzwiller wave functions in finite dimensions,” *Eur. Phys. Lett.* **98**, 27006 (2012).
- [26] Thomas Maier, Mark Jarrell, Thomas Pruschke, and Matthias H. Hettler, “Quantum cluster theories,” *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1027–1080 (2005).
- [27] Manuela Capello, Federico Becca, Michele Fabrizio, Sandro Sorella, and Erio Tosatti, “Variational description of Mott insulators,” *Phys. Rev. Lett.* **94**, 026406 (2005).
- [28] U. S. Kaluarachchi, S. L. Bud’ko, P. C. Canfield, and V. Taufour, “Tricritical wings and modulated magnetic phases in LaCrGe_3 under pressure,” *Nat. Comm.* **8**, 546 (2017).
- [29] M. Brando, D. Belitz, F. M. Grosche, and T. R. Kirkpatrick, “Metallic quantum ferromagnets,” *Rev. Mod. Phys.* **88**, 025006 (2016).
- [30] E. Lengyel, M. E. Macovei, A. Jesche, C. Krellner, C. Geibel, and M. Nicklas, “Avoided ferromagnetic quantum critical point in CeRuPO ,” *Phys. Rev. B* **91**, 035130 (2015).
- [31] D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, and T. Vojta, “Nonanalytic behavior of the spin susceptibility in clean Fermi systems,” *Phys. Rev. B* **55**, 9452–9462 (1997).
- [32] D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, and Jörg Rollbühler, “Tricritical behavior in itinerant quantum ferromagnets,” *Phys. Rev. Lett.* **94**, 247205 (2005).
- [33] U. Karahasanovic, F. Krüger, and A. G. Green, “Quantum order-by-disorder driven phase reconstruction in the vicinity of ferromagnetic quantum critical points,” *Phys. Rev. B* **85**, 165111 (2012).
- [34] D. Belitz and T. R. Kirkpatrick, “Quantum triple point and quantum critical end points in metallic magnets,” *Phys. Rev. Lett.* **119**, 267202 (2017).
- [35] Carmine Autieri and Canio Noce, “First principles study of structural, magnetic and electronic properties of CrAs ,” *Philosophical Magazine* **97**, 3276–3295 (2017).

- [36] Elena Gati, John M. Wilde, Rustem Khasanov, Li Xiang, Sachith Dissanayake, Ritu Gupta, Masaaki Matsuda, Feng Ye, Bianca Haberl, Udhara Kaluarachchi, Robert J. McQueeney, Andreas Kreyssig, Sergey L. Bud'ko, and Paul C. Canfield, “Formation of short-range magnetic order and avoided ferromagnetic quantum criticality in pressurized LaCrGe_3 ,” *Phys. Rev. B* **103**, 075111 (2021).
- [37] Ioannis Giannakis, Justin Leshen, Mariam Kawai, Sheng Ran, Chang-Jong Kang, Shanta R. Saha, Y. Zhao, Z. Xu, J. W. Lynn, Lin Miao, L. Andrew Wray, Gabriel Kotliar, Nicholas P. Butch, and Pegor Aynajian, “Orbital-selective Kondo-lattice and enigmatic f-quasiparticles emerging from inside the antiferromagnetic phase of a heavy fermion,” *Science Advances* **5**, 9061 (2019).
- [38] Q. Y. Chen, X. B. Luo, D. H. Xie, M. L. Li, X. Y. Ji, R. Zhou, Y. B. Huang, W. Zhang, W. Feng, Y. Zhang, L. Huang, Q. Q. Hao, Q. Liu, X. G. Zhu, Y. Liu, P. Zhang, X. C. Lai, Q. Si, and S. Y. Tan, “Orbital-selective Kondo entanglement and antiferromagnetic order in USb_2 ,” *Phys. Rev. Lett.* **123**, 106402 (2019).
- [39] J. Leciejewicz, R. Troć, A. Murasik, and A. Zygmunt, “Neutron-diffraction study of antiferromagnetism in USb_2 and UBi_2 ,” *Phys. stat. sol. (b)* **22**, 517–526 (1967).
- [40] R. Doradziński and J. Spalek, “Antiferromagnetic heavy-fermion and Kondo-insulating states with compensated magnetic moments,” *Phys. Rev. B* **56**, R14239–R14242 (1997).
- [41] Dai Aoki, Piotr Wiśniewski, Kousaku Miyake, Narumi Watanabe, Yoshihiko Inada, Rikio Settai, Etsuji Yamamoto, Yoshinori Haga, and Yoshichika Onuki, “Crystal growth and cylindrical fermi surfaces of USb_2 ,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 2182–2185 (1999).
- [42] M.F. Beaux, T. Durakiewicz, L. Moreschini, M. Grioni, F. Offi, G. Monaco, G. Panaccione, J.J. Joyce, E.D. Bauer, J.L. Sarrao, M.T. Butterfield, and E. Guzewicz, “Electronic structure of single crystal UPd_3 , UGe_2 , and USb_2 from hard x -ray and angle-resolved photoelectron spectroscopy,” *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **184**, 517 – 524 (2011).
- [43] Z. E. Brubaker, Y. Xiao, P. Chow, C. Kenney-Benson, J. S. Smith, H. Cynn, C. Reynolds, N. P. Butch, R. J. Zieve, and J. R. Jeffries, “Valence instability across the magnetostructural transition in USb_2 ,” *Phys. Rev. B* **101**, 085123 (2020).
- [44] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, “New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance,” *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494–497 (1980).
- [45] P. S. Riseborough, “Heavy fermion semiconductors,” *Advances in Physics* **5649**, 257–320 (2000).
- [46] Maxim Dzero, Kai Sun, Victor Galitski, and Piers Coleman, “Topological Kondo insulators,” *Phys. Rev. Lett.* **104**, 106408 (2010).
- [47] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang, “Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells,” *Science* **314**, 1757–1761 (2006).
- [48] W. F. Brinkman and T. M. Rice, “Application of Gutzwiller’s variational method to the metal-insulator transition,” *Phys. Rev. B* **2**, 4302–4304 (1970).
- [49] Claudio Giannetti, Massimo Capone, Daniele Fausti, Michele Fabrizio, Fulvio Parmigiani, and Dragan Mihailovic, “Ultrafast optical spectroscopy of strongly correlated materials and high-temperature superconductors: a non-equilibrium approach,” *Adv. Phys.* **65**, 58–238 (2016).

- [50] S. Dal Conte, L. Vidmar, D. Golež, M. Mierzejewski, G. Soavi, S. Peli, F. Banfi, G. Ferrini, R. Comin, B. M. Ludbrook, L. Chauviere, N. D. Zhigadlo, H. Eisaki, M. Greven, S. Lupi, A. Damascelli, D. Brida, M. Capone, J. Bonča, G. Cerullo, and C. Giannetti, “Snapshots of the retarded interaction of charge carriers with ultrafast fluctuations in cuprates,” *Nature Physics* **11**, 421 (2015).
- [51] M. Mitrano, A. Cantaluppi, D. Nicoletti, S. Kaiser, A. Perucchi, S. Lupi, P. Di Pietro, D. Pontiroli, M. Riccò, S. R. Clark, D. Jaksch, and A. Cavalleri, “Possible light-induced superconductivity in K3C60 at high temperature,” *Nature* **530**, 461–464 (2016).
- [52] Marco Schiró and Michele Fabrizio, “Time-dependent mean field theory for quench dynamics in correlated electron systems,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 076401 (2010).
- [53] Matteo Sandri, Marco Schiró, and Michele Fabrizio, “Linear ramps of interaction in the fermionic Hubbard model,” *Phys. Rev. B* **86**, 075122 (2012).
- [54] Rémi Desbuquois, Michael Messer, Frederik Görg, Kilian Sandholzer, Gregor Jotzu, and Tilman Esslinger, “Controlling the Floquet state population and observing micromotion in a periodically driven two-body quantum system,” *Phys. Rev. A* **96**, 053602 (2017).
- [55] Jian Li, M.P. Silveri, K.S. Kumar, J.-M. Pirkkalainen, A. Vepsäläinen, W.C. Chien, J. Tuorila, M.A. Sillanpää, P.J. Hakonen, E.V. Thuneberg, and G.S. Paraoanu, “Motional averaging in a superconducting qubit,” *Nature Communications* **4**, 1420 (2013).
- [56] Yiyang Yan, Zhiguo Lü, JunYan Luo, and Hang Zheng, “Effects of counter-rotating couplings of the Rabi model with frequency modulation,” *Phys. Rev. A* **96**, 033802 (2017).

5 Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej

- Uniwersytet Jagielloński, Kraków
 - 1/10/2011 - 30/09/2015: studia doktoranckie pod kierunkiem prof. Józefa Spałka (promotor pomocniczy: dr. Jan Kaczmarczyk). W trakcie studiów prowadziłem teoretyczne badania:
 - a) nad rozwinięciem metody DE-GWF do opisu nadprzewodnictwa w modelu sieci Andersona
 - b) ferromagnetyzmu i punktów krytycznych w UGe_2
 - c) właściwości He^3 w polu magnetycznym
 - d) termoelektrycznych właściwości w nadprzewodzących złączach tunelowych w tym na bazie grafenu
 - 1/10/2015 - 31/10/2015: staż podoktorski w grupie prof. J. Spałka. W trakcie stażu badałem właściwości stanu nadprzewodzącego realizowanego w modelu sieci Andersona
- Institute of Science and Technology (IST Austria), Klosterneuburg, Austria
 - 24/11/2014 - 7/12/2014: staż naukowy podczas którego z dr. J. Kaczmarczykiem pracowaliśmy nad formułą metody DE-GWF do stanu normalnego w modelu sieci Andersona
 - 12/01/2015 - 24/01/2015: staż naukowy podczas którego z dr. J. Kaczmarczykiem pracowaliśmy nad formułą metody DE-GWF do stanu nadprzewodzącego w modelu sieci Andersona
- International School for Advanced Studies (SISSA), Triest, Włochy
 - 1/11/2015 - 31/10/2017: realizacja projektu *Non-equilibrium dynamics of strongly correlated fermions with the use of the Gutzwiller wave function* w ramach programu MOBILNOŚĆ PLUS w grupie prof. Michele Fabrizio. W tym czasie prowadziłem teoretyczne badania:
 - a) nad rozwinięciem czasowo zależnej metody przybliżenia Gutzwillera aby uwzględniła wysokoenergetyczne kwantowe fluktuacje.
 - b) stanu topologicznego izolatora Kondo
 - c) stanu nadprzewodzącego w modelu Hubbarda
- Międzynarodowe Centrum Badawcze MagTop, Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, Warszawa
 - 1/11/2017 - obecnie: Adiunkt w grupie prof. Tomasza Dietla. W czasie zatrudnienia w MagTopie prowadzę teoretyczne badania:
 - a) stanów topologicznych w krystalicznym topologicznym izolatorze w klasie materiałów SnTe.
 - b) nad wykorzystaniem faz geometrycznych do obliczeń kwantowych na defektach zlokalizowanych w półprzewodnikach charakteryzujących się efektywnym spinem $3/2$ w obecności wnęki QED.
 - c) mechanizmów prowadzących do przemian między ferromagnetyzmem a antyferromagnetyzmem w skorelowanych metalach
 - d) nierównowagowych właściwości skorelowanych układów fermionowych

6 Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę

6.1 Dydaktyka

- Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, Warszawa
 - semestr zimowy 2020/2021: prowadziłem w języku angielskim **wykład monograficzny dla doktorantów** w Instytucie Fizyki PAN (Warszawa) o tytule “Condensed Matter Theory” w wymiarze 30h
 - semestr zimowy 2018/2019: prowadziłem w języku angielskim **wykład monograficzny dla doktorantów** w Instytucie Fizyki PAN (Warszawa) o tytule “Condensed Matter Theory” w wymiarze 30h
Plan wykładu można znaleźć na [http://www.ifpan.edu.pl/msdifpan/wyklady2018_19/Condensed_matter_theory_winter_2018-19.pdf]
- Uniwersytet Jagielloński, Kraków
 - 1-31/07/2015 - byłem opiekunem miesięcznej praktyki wakacyjnej studenta trzeciego roku fizyki
 - semestr letni 2014: byłem tutorem na pierwszej pracowni fizycznej w wymiarze 45h
 - semestr zimowy 2013/2014: prowadziłem ćwiczenia do wykładu “Fizyka” dla kierunku Geologia na UJ w wymiarze 30h
 - semestr zimowy 2012/2013: prowadziłem ćwiczenia do wykładu “Fizyka” dla kierunku Geologia na UJ w wymiarze 30h
 - rok akademicki 2011/2012 i 2012/2013: współprowadziłem zajęcia z ramienia Uniwersytetu Jagiellońskiego przygotowujące do olimpiady fizycznej uczniów liceów. Nasi podopieczni dochodzili do finałów jak i stawali się laureatami krajowej olimpiady z fizyki i astronomii.
 - 1-31/07/2011 - byłem opiekunem miesięcznej praktyki wakacyjnej studentki trzeciego roku fizyki

6.2 Organizacja konferencji

- 05/01/2018 jednodniowa konferencja naukowa “Symposium on the physics of Majorana bound states”, Warszawa, Polska - wraz z prof. A. Wiśniewskim byłem odpowiedzialny za techniczne aspekty organizacji konferencji
- 22-26/09/2014 konferencja “From spins to Cooper pairs: New physics of the spins”, Zakopane, Polska - byłem członkiem lokalnego komitetu organizacyjnego
- 7-12/10/2013 konferencja “XVI Narodowej Konferencji Nadprzewodnictwa” Zakopane, Polska - byłem członkiem lokalnego komitetu organizacyjnego

6.3 Popularyzacja nauki

- 23/10/2010 - brałem udział w organizacji Małopolskiej Nocy Naukowców
- 14-16/05/2009 - brałem udział w organizacji Festiwalu Nauki w Krakowie

7 Inne informacje dotyczące kariery zawodowej wnioskodawcy

7.1 Krótki opis prac opublikowanych po doktoracie nie będących częścią osiągnięcia naukowego

- **M. M. Wysokiński**, J. Kaczmarczyk, *Journal of Physics: Condensed Matter* **29**, 085604 (2017), *Unconventional superconductivity in generalized Hubbard model: Role of electron-hole symmetry breaking terms*

W pracy badaliśmy wpływ łamiącego symetrię cząstka-dziura oddziaływania ładunek-wiązanie na właściwości niestabilności nadprzewodzącej w modelu Hubbarda na sieci kwadratowej. Amplituda, K tego oddziaływania nawet dla najbliższych sąsiadów jest uznana za znacznie mniejszą od tej parametryzującej oddziaływanie Hubbarda, U i stąd często zaniedbywana. Jednakże w wypadku gdy amplituda U jest znacznie większa niż całka przeskoku do najbliższych sąsiadów t , jest prawdopodobne, iż amplituda K choć mała w stosunku do U i t , będzie porównywalna z całką przeskoku do drugich sąsiadów t' , która również łamie symetrię cząstka-dziura. W konsekwencji obydwaj wyrazy, przeskok do drugich sąsiadów jak i oddziaływanie ładunek - wiązanie mogą mieć istotny wpływ na asymetrię stanu nadprzewodzącego ze względu na domieszkowanie.

W naszej pracy zbadaliśmy ten problem analizując metodą DE-GWF właściwości nadprzewodzącego stanu w domieszkowanym modelu Hubbarda w zależności od wspomnianych wyrazów łamiących symetrię cząstka-dziura na sieci kwadratowej. Otrzymane wyniki pokazały, iż wpływ na asymetrię przerwy każdego z wyrazów oddzielnie dla badanego mechanizmu nadprzewodnictwa jest przeciwny. Mianowicie niezerowy parametr t' prowadzi do większej przerwy dla dziurowego domieszkowania, podczas gdy $K \neq 0$ do większej przerwy dla elektronowego domieszkowania. Połączony efekt obydwu wyrazów jednakże prowadzi do większej przerwy w obszarze domieszkowania dziurowego i znacznej asymetrii w funkcji domieszkowania. W celu dodatkowej charakteryzacji otrzymanego stanu nadprzewodzącego w zależności od domieszkowania zbadaliśmy do jakiego stopnia analizowana symetria d jest zgodna z typowo spodziewaną dla modelu Hubbarda symetrią $d_{x^2-y^2}$. Otrzymaliśmy, iż daleko zasięgowe korelacje nadprzewodzące powodują znaczne odejście od symetrii $d_{x^2-y^2}$.

- W. Brzezicki, **M. M. Wysokiński**, T. Hyart, *Physical Review B: Rapid Communication* **100**, 121107 (2019), *Topological properties of multilayers and surface steps in the SnTe material class*

W naszej pracy dogłębnie zbadaliśmy właściwości nisko-energetycznych stanów pojawiających się na atomowych schodkach obecnych na powierzchni topologicznego izolatora krystalicznego $\text{Sn}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Te}_{1-y}\text{Se}_y$. Wykorzystując znalezione przybliżone symetrie w tej strukturze skonstruowaliśmy topologiczne niezmienniki, takie jak lustrzane i spinowe numery Cherna. Na ich podstawie pokazaliśmy że na schodku pojawiają się stany brzegowe gdy po obu stronach schodka niezmienniki są różne. Ze względu na to, iż wspomniane stany prowadzą do znacznej gęstości stanów, układ jest podatny na różne typy niestabilności. W naszej pracy rozważyliśmy ferromagnetyzm jako realistyczną możliwość. Pokazaliśmy, iż magnetyczne ściany domenowe powodują pojawienie się niskoenergetycznych stanów związanych ponieważ regiony z przeciwną magnetyzacją są topologicznie różne w obecności niesymorficznej chiralnej i lustrzanej symetrii. Otrzymane wyniki pozwalają na potencjalne wyjaśnienie obserwacji zero-napięciowego pików w przewodności w rozważanej klasie materiałów [Mazur et al., *Phys. Rev. B* **100**, 041408(R) (2019)].

- **M. M. Wysokiński**, M. Płodzień, M. Trif, *Physical Review B: Letter* **104**, L041402 (2021), *Berry phase induced entanglement of hole-spin qubits in a microwave cavity*

W naszej pracy badaliśmy potencjał dziur o efektywnym spinie $3/2$ zlokalizowanych w strukturach półprzewodnikowych do odpornych na szum obliczeń kwantowych. Dokładnie, rozważyliśmy dwie dziury oddziałujące ze wspólnym polem fotonowym pochodzącym z wnętrza mikrofa-

lowej. Dziura o spinie $3/2$ może być wykorzystana do obliczeń kwantowych zarówno na rozszczepionym przez pole magnetyczne spektrum jak i na zdegenerowanych dubletach Kramersa w obecności jedynie pola elektrycznego. W tym drugim przypadku operacji dokonuje wygenerowana przez zmienne w czasie pole elektryczne, nie-Abelowa faza Berryego. Choć w założeniach jest to bardzo efektywny i energetycznie nie wymagający sposób wykonywania kwantowych obliczeń z powodu braku konieczności użycia pola magnetycznego, odczyt takiego qubitów jest niemożliwy w ramach tradycyjnych metod spektroskopowych. W naszej pracy zaproponowaliśmy nowy sposób odczytu rozważanego qubitów. Pokazaliśmy, iż w obecności mikrofalowej wnęki nie-Abelowa faza Berryego wdrukowywuje się w pole fotonowe poprzez zależne od początkowej konfiguracji qubitów przesunięcie częstości co pozwala na odczyt qubitów. Dodatkowo pokazaliśmy, iż nie-Abelowe fazy Berryego dwóch niezależnie manipulowanych dziur oddziałują ze sobą dzięki wspólnemu polu fotonowemu co pozwala na ich splątanie. Pokazaliśmy, iż opracowana przez nas metoda splątania dzięki geometrycznej naturze jest bardziej odporna na szumy niż w przypadku konwencjonalnych, nie-geometrycznych implementacji.

7.2 Nagrody, stypendia i granty naukowe

- 2019: 3-letnie (2020-2022) stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w Polsce dla wybitnych młodych naukowców
<https://www.gov.pl/attachment/29cf556e-78f0-452e-a624-dae2c57db3db>
- 2017: nagroda START Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej (FNP) dla młodych, utalentowanych naukowców w Polsce
<https://www.fnp.org.pl/laureaci-start-2017/>
- 2017: wygrana grantu Narodowego Centrum Nauki SONATINA 1; drugie miejsce w panelu ST - Nauki Ścisłe i Techniczne. **Zrezygnowałem** z realizacji grantu gdyż z przyczyn formalnych nie można go było łączyć z pozycją adiunkta (którą w tym samym czasie wygrałem) w Międzynarodowym Centrum Badawczym MagTop finansowanego przez Fundację na Rzecz Nauki Polskiej.
<https://ncn.gov.pl/konkursy/wyniki/2017-08-03-sonatina1>
- 2015: wygrana grantu “MOBILNOŚĆ PLUS” Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego; 9 miejsce na liście rankingowej obejmującej wszystkie dziedziny nauki. W ramach realizacji grantu przez dwa lata 1/11/2015-31/10/2017 prowadziłem badania w International School for Advanced Studies w Trieście, Włochy
https://www.gov.pl/documents/1068557/1069061/Laureaci_IV_edycji_Mobilno%C5%9Bci_Plus.pdf/555893c7-1ab1-f6c9-6d3a-e331500bbf7e
- 2012: 3-letnie (2013-2015) stypendium “DOCTUS - Małopolski fundusz stypendialny dla doktorantów” Małopolskiego Centrum Przedsiębiorczości z siedzibą w Krakowie.

7.3 Wystąpienia konferencyjne i seminaryjne

7.3.1 Wystąpienia zaproszone

1. 10/05/2019 “Quantum Ferromagnetism and Related Phenomena”, Max Planck Institute for Complex Systems, Drezno, Niemcy. Na zaproszenie organizatorów D. Belitz, M. Brando, A. Huxley wygłosiłem wykład *Two-channel Stoner mechanism for ferromagnetic/antiferromagnetic phase transitions in metallic magnets*
<https://www.pks.mpg.de/qfm19>
2. 26/06/2019 “Superstripes 2019”, Ischia, Włochy. Na zaproszenie organizatora A. Bianconi wygłosiłem wykład *Two-channel Stoner mechanism for ferromagnetic/antiferromagnetic phase*

3. 17/09/2019 “45. Zjazd Fizyków Polskich”, Kraków, Polska. Na zaproszenie organizatorów (m.in. prof. J. Spałek) wygłosiłem wykład *Correlated fermions out-of-equilibrium*
<http://www.45zfp.uj.edu.pl/#/program/ksiazka-streszczen>
4. 18/09/2018 “From Spins to Cooper Pairs: Fundamental Aspects of Superconductivity”, Zakopane, Polska. Na zaproszenie organizatora prof. J. Spałka wygłosiłem wykład *Mechanisms of phase transitions between ferro- and antiferro- magnetic orderings in itinerant d and f electron materials*
<http://th-www.if.uj.edu.pl/ztms/eng/conference2018/speakers.php>
5. 8/06/2017 “Superstripes 2017”, Ischia, Włochy. Na zaproszenie organizatora A. Bianconi wygłosiłem wykład *Topological Kondo semi-metals*
<https://www.superstripes.net/superstripes-2017/confirmed-invited-speakers?start=2>

7.3.2 Wykłady

1. 12/12/2019 “Recent Developments in the Theory of Topological Systems”, Instytut Fizyki UMCS, Lublin, Polska. Na konferencji wygłosiłem wykład *Electrical control of entanglement for spin 3/2*
2. 5/09/2018 “New Generations in Strongly Correlated Electron Systems 2018”, San Sebastian, Hiszpania . Na konferencji wygłosiłem wykład *Efficient variational approach to strongly correlated fermions at and far from equilibrium*
3. 2/10/2017 “FisMat 2017 Conference”, Triest, Włochy. Na konferencji zorganizowanej w International Center of Theoretical Physics wygłosiłem wykład *Variational Schrieffer-Wolff transformation: Mott physics at and far from equilibrium*
4. 12/07/2016 “Condensed Matter in the City”, Londyn, Wielka Brytania. Na konferencji zorganizowanej przez Royal Holloway University of London wygłosiłem wykład *Correlation driven failed topological Kondo insulators*
5. 29/09/2016 “New Generations in Strongly Correlated Electron Systems 2016”, Triest, Włochy. Na konferencji wygłosiłem wykład *Many-body breakdown of the indirect gap in topological Kondo insulators*
6. 7/07/2015 “20th International Conference on Magnetism”, Barcelona, Hiszpania. Na konferencji wygłosiłem wykład *Classical and quantum criticalities in the itinerant ferromagnet UGe_2 : A microscopic interpretation*
7. 25/09/2014 “From Spins to Cooper Pairs: New Physics of the Spins”, Zakopane, Polska. Na konferencji wygłosiłem wykład *Microscopic model for ferromagnetism in UGe_2*
8. 23/11/2013 “Katowicko-Krakowskie Seminarium z Fizyki Ciała Stałego”, Kraków, Polska. Na konferencji wygłosiłem wykład *Andreev processes in graphene*
9. 12/10/2013 “XVI National Conference on Superconductivity”, Zakopane, Polska. Na konferencji wygłosiłem wykład *Seebeck effect in the graphene-superconductor junction*
10. 6/10/2011 “XVI Training Course in the Physics of Strongly Correlated Systems”, Vietri sul Mare, Włochy. Na warsztatach wygłosiłem wykład *Magnetization of liquid helium 3 within SGA approach to Hubbard model: Comparison with experiment*

7.3.3 Plakaty

1. 10/2013 “XVI National Conference on Superconductivity”, Zakopane, Polska. Plakat pt. *Diagrammatic expansion for the Gutzwiller wave function*
2. 09/2013 “Autumn School on Correlated Electrons: Emergent Phenomena in Correlated Matter”, Jülich, Niemcy. Plakat pt. *Diagrammatic expansion for the Gutzwiller wave function*
3. 09/2012 “Autumn School on Correlated Electrons: from Models to Materials”, Jülich, Niemcy. Plakat pt. *Thermoelectric effect in the normal conductor-superconductor junction: A BTK approach*
4. 10/2011 “XVI Training Course in the Physics of Strongly Correlated Systems”, Vietri sul Mare, Włochy. Plakat pt. *Magnetic and thermodynamic properties of SGA mean-field approach to Hubbard model: Application to liquid helium 3*

7.3.4 Seminaria

1. 26/04/2021 Ames Laboratory, USA; zapraszający: prof. P. Canfield; tytuł: *Antiferromagnetic component due to orbital selective ferromagnetism in $La_5Co_2Ge_3$* - seminarium online
2. 19/10/2018 Instytut Fizyki, Uniwersytet Warszawski, Warszawa; zapraszający: prof. P. Jakubczyk; tytuł: *Numerically efficient variational methods to strongly correlated fermion systems at and out of equilibrium*
3. 21/05/2018 Instytut Fizyki, Uniwersytet Jagielloński, Kraków; zapraszający: prof. J. Spałek; tytuł: *Efficient variational approach to strongly correlated fermions at and far from equilibrium*
4. 10/01/2018 Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, Warszawa; zapraszający: prof. A. Wiśniewski; tytuł: *Theoretical understanding of itinerant ferromagnetism in d and f electron compounds.*
5. 14/12/2017 Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, Warszawa; zapraszający: prof. Ł. Cywiński; tytuł: *Efficient variational approach to strongly correlated fermions at and far from equilibrium*
6. 10/02/2017 International School for Advanced Studies (SISSA), Trieste, Włochy; tytuł: *Gutzwiller wave function based methods*
7. 28/11/2014 Institute of Science and Technology Austria; zapraszający: dr. J. Kaczmarczyk; tytuł: *Magnetism of the heavy fermion compound UGe_2 described on the basis of the Anderson lattice model*
8. 14/10/2014 Instytut Fizyki, Uniwersytet Marii Curie Skłodowskiej; zapraszający prof. T. Domański; tytuł: *Microscopic mechanism for ferromagnetism in UGe_2*
9. 8/01/2014 Instytut Fizyki, Politechnika Wrocławska; zapraszający: prof. P. Machnikowski; tytuł: *Andreev processes in the graphene based superconducting hybrid structures.*
10. 14/03/2013 Instytut Fizyki, Uniwersytet Warszawski; zapraszający: prof. J. Majewski; tytuł: *Andreev processes in graphene-superconductor hybrid structures*



(podpis wnioskodawcy)