

---

# **Właściwości orbitalno-selektywnej fazy Motta w niskowymiarowych systemach wielopasmowych**

---

Dr Jacek HERBRYCH

Wydział Podstawowych Problemów Techniki  
Politechnika Wrocławska

20 stycznia 2022

## Spis treści

<b>1</b>	<b>Podstawowe informacje</b>	<b>1</b>
1.1	Dane osobowe . . . . .	1
1.2	Wykształcenie . . . . .	1
1.3	Dotychczasowe zatrudnienie oraz staże naukowe . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Wskazane osiągnięcie naukowe</b>	<b>3</b>
2.1	Tytuł osiągnięcia naukowego . . . . .	3
2.2	Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego . . . . .	3
	Krótki opis oraz autorski udział w publikacjach . . . . .	3
2.3	Opis osiągnięcia . . . . .	6
	Wprowadzenie . . . . .	6
	Statyczne właściwości spinów . . . . .	10
	Dynamiczne właściwości spinów . . . . .	17
	Korelacje i transport ładunku . . . . .	21
	Podsumowanie . . . . .	26
	Bibliografia . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Pozostałe osiągnięcia naukowo-badawcze</b>	<b>31</b>
3.1	Publikacje naukowe w czasopismach bazy JCR . . . . .	31
	Krótki opis . . . . .	34
3.2	Dane bibliometryczne . . . . .	35
3.3	Kierowanie projektami badawczymi . . . . .	35
3.4	Uczestnictwo w programach europejskich . . . . .	35
3.5	Wystąpienia naukowe . . . . .	36
	Referaty ustne . . . . .	36
	Prezentacje w formie plakatu . . . . .	37
	Referaty wygłoszone na zaproszenie w instytucjach naukowych . . . . .	37
3.6	Członkostwo w towarzystwach naukowych . . . . .	37
3.7	Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych . . . . .	38
3.8	Współpraca naukowa . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Dorobek dydaktyczny oraz działalność administracyjna</b>	<b>39</b>
4.1	Działalność dydaktyczna . . . . .	39
4.2	Opieka naukowa nad studentami i doktorantami . . . . .	39
4.3	Działalność administracyjna . . . . .	39

## Podstawowe informacje

### 1.1 Dane osobowe

*Imię i nazwisko* Jacek Herbrych

*Miejsce zatrudnienia* Wydział Podstawowych Problemów Techniki  
Politechnika Wroclawska  
Wyb. Wyspiańskiego 27  
50-370 Wrocław, Polska

*Telefon* +48 519 625 993

*Email* jacek.herbrych@pwr.edu.pl

*Webpage* <https://herbrychjacek.bitbucket.io>

*ORCID* 0000-0001-9860-2146

### 1.2 Wykształcenie

**Doktor nauk fizycznych** 2013

Wydział Matematyki i Fizyki  
Uniwersytet w Lublanie, Słowenia

*Tytuł pracy* **Finite-temperature dynamics of quantum spin chains**

*Promotor* Prof. Dr Peter Prelovšek

*Recenzenci* Prof. Dr Tomaž Prosen (Uniwersytet w Lublanie)  
Prof. Dr Denis Arčon (Instytut Jožefa Stefana)  
Prof. Dr Xenophon Zotos (Uniwersytet Kreteński)

**Magister fizyki** 2010

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej  
Uniwersytet Łódzki, Polska

*Tytuł pracy* **Transformacje Lorentza w zdeformowanych przestrzeniach Minkowskiego**

*Promotor* Prof. Dr Cezary Gonera

*Recenzent* Prof. Dr Piotr Kosiński (Uniwersytet Łódzki)

### 1.3 Dotychczasowe zatrudnienie oraz staże naukowe

**od IV/2019** Adiunkt

Wydział Podstawowych Problemów Techniki  
Politechnika Wroclawska  
Wroclaw, Polska

**X/2016 - III/2019** Pracownik naukowy

Wydział Inżynierii Materiałowej i Technologii  
Oak Ridge National Laboratory  
Oak Ridge, USA

**X/2016 - III/2019** Pracownik naukowy/Postdoc w grupie Prof. Dr Elbio Dagotto

Wydział Fizyki i Astronomii  
Uniwersytet Tennessee  
Knoxville, USA

**I/2014 - VIII/2016** Pracownik naukowy

Crete Center for Quantum Complexity and Nanotechnology  
Heraklion, Grecja

**I/2014 - VI/2016** Pracownik naukowy/Postdoc w grupie Prof. Dr Xenophona Zotosa

Wydział Fizyki  
Uniwersytet Kreteński  
Heraklion, Grecja

**V/2012** Staż naukowy w grupie Prof. Dr Xenophona Zotosa

Foundation for Research and Technology - Hellas  
Heraklion, Grecja

**X/2010 - XII/2013** Pracownik naukowy zatrudniony na stanowisku "Young researcher"

Wydział Fizyki Teoretycznej  
Instytut Jožefa Stefana  
Ljubljana, Słowenia

## Wskazane osiągnięcie naukowe

### 2.1 Tytuł osiągnięcia naukowego

Właściwości orbitalno-selektywnej fazy Motta w niskowymiarowych systemach wielopasmowych

### 2.2 Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego

- H1** *Spin dynamics of the block orbital-selective Mott phase*,  
J. Herbrych, N. Kaushal, A. Nocera, G. Alvarez, A. Moreo, and E. Dagotto,  
Nat. Commun. **9**, 3736 (2018).
- H2** *Novel Magnetic Block States in Low-Dimensional Iron-Based Superconductors*,  
J. Herbrych, J. Heverhagen, N. D. Patel, G. Alvarez, M. Daghofer, A. Moreo, and  
E. Dagotto,  
Phys. Rev. Lett. **123**, 027203 (2019).
- H3** *Block-spiral magnetism: An exotic type of frustrated order*,  
J. Herbrych, J. Heverhagen, G. Alvarez, M. Daghofer, A. Moreo, and E. Dagotto,  
Proc. Natl. Acad. Sci. USA **117**, 16226 (2020).
- H4** *Block orbital-selective Mott insulators: a spin excitation analysis*,  
J. Herbrych, G. Alvarez, A. Moreo, and E. Dagotto,  
Phys. Rev. B **102**, 115134 (2020).
- H5** *Interaction-induced topological phase transition and Majorana edge states in low-dimensional orbital-selective Mott insulators*,  
J. Herbrych, M. Środa, G. Alvarez, M. Mierzejewski, and E. Dagotto,  
Nat. Commun. **12**, 2955 (2021).
- H6** *Quantum magnetism of iron-based ladders: blocks, spirals, and spin flux*,  
M. Środa, E. Dagotto, and J. Herbrych,  
Phys. Rev. B **104**, 045128 (2021).

#### Krótki opis oraz autorski udział w publikacjach

[H1] *Spin dynamics of the block orbital-selective Mott phase*,  
J. Herbrych, N. Kaushal, A. Nocera, G. Alvarez, A. Moreo, and E. Dagotto,  
Nat. Commun. **9**, 3736 (2018)

W tej pracy przedstawiono teoretyczny opis dynamicznego współczynnika struktury spinowej  $S(q, \omega)$  w blokowej orbitalno-selektywnej fazie Motta (OSMP - orbital-selective Mott phase), tj. w układzie ferromagnetycznych "wysp spinowych" sprzęgniętych antyferromagnetycznie wzdłuż nóg,  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ . W zgodzie z eksperymentalnymi wynikami

otrzymanymi przy pomocy nieelastycznego rozpraszania neutronów (INS - inelastic neutron scattering) w związkach na bazie żelaza odkryto dwa typy wzbudzeń: niskoenergetyczne dyspersyjne oraz wysokoenergetyczne zlokalizowane. Pierwsze z tych wzbudzeń opisują dynamikę ferromagnetycznych wysp blokowych podobną do (jednocząstkowych) fal spinowych, podczas gdy drugim przypisano nowy rodzaj wzbudzeń spinowych kontrolowany przez oddziaływanie Hunda.

*Udział autora:* Zainicjowałem projekt badawczy. Współtworzyłem kod grupy renormalizacji macierzy gęstości i przeprowadziłem wszystkie symulacje numeryczne. Dokonałem interpretacji wyników badań, m.in. zidentyfikowałem wzbudzenia dla  $q > \pi/2$  jako wysokoenergetyczne wzbudzenia niezależne od pędu. Zaprojektowałem jakościowy model wzbudzeń akustycznych i optycznych. Przedstawiłem analizę oddziaływania Hunda dla modu optycznego. Napisałem większość tekstu artykułu. Mój wkład w powstanie tej pracy szacuję na  $\sim 70\%$ .

**[H2] Novel Magnetic Block States in Low-Dimensional Iron-Based Superconductors, J. Herbrych, J. Heverhagen, N. D. Patel, G. Alvarez, M. Daghofer, A. Moreo, and E. Dagotto,**

**Phys. Rev. Lett. 123, 027203 (2019)**

Analiza przedstawiona w tej pracy wykazała, że domieszkowanie elektronów w fazie OSMF indukuje całą klasę nowych stanów blokowych, wykraczającą poza wcześniej poznany  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  porządek z wektorem falowym  $\pi/2$ . Ponadto przedstawiono efektywny model wielopasmowej fazy OSMF, tzw. uogólniony model Kondo-Heisenberga.

*Udział autora:* Zainicjowałem projekt badawczy. Dostosowałem kod i wykonałem wszystkie symulacje numeryczne. Dokonałem interpretacji wyników badań, m.in. przeprowadziłem analizę statycznego współczynnika struktury spinowej. Opracowałem i przetestowałem hipotezę "stabilizacji niestabilności Fermiego", tj. uporządkowanie magnetyczne jest zgodne z gęstością elektronową. Wyprowadziłem i przetestowałem efektywny hamiltonian, tj. uogólniony model Kondo-Heisenberga. Napisałem większość tekstu artykułu. Mój wkład w powstanie tej pracy szacuję na  $\sim 70\%$ .

**[H3] Block-spiral magnetism: An exotic type of frustrated order,**

**J. Herbrych, J. Heverhagen, G. Alvarez, M. Daghofer, A. Moreo, and E. Dagotto,**

**Proc. Natl. Acad. Sci. USA 117, 16226 (2020)**

W tej pracy przedstawiono, że konkurujące skale energii pozornie niesfrustrowanego (nonfrustrated) OSMF w niskowymiarowym, wielopasmowym modelu Hubbarda mogą doprowadzić do "chiralnego magnetyzmu bloków", tj. do stanu z obracającymi się względem siebie ferromagnetycznymi wyspami. Ponadto, analiza elektronowych stopni swobody ujawniła kwazicząstki łamiące parzystość.

*Udział autora:* Zainicjowałem projekt badawczy. Dostosowałem kod i wykonałem wszystkie symulacje numeryczne. Dokonałem interpretacji wyników badań, m.in. przeprowadziłem szczegółową analizę funkcji korelacji spinowych oraz funkcji korelacji chiralności. Zbudowałem i przetestowałem hipotezę magnetycznego uporządkowania blokowo-spiralnego na podstawie wyników funkcji korelacji dimerów. Zidentyfikowałem kwazicząstki łamiące parzystość. Przedstawiłem argumenty fenomenologiczne dla efektywnego hamiltonianu spinowego. Napisałem większość tekstu artykułu. Mój wkład w powstanie tej pracy szacuję na  $\sim 70\%$ .

**[H4] Block orbital-selective Mott insulators: a spin excitation analysis,**

**J. Herbrych, G. Alvarez, A. Moreo, and E. Dagotto,**

**Phys. Rev. B 102, 115134 (2020)**

Praca przedstawia dokładną analizę wzbudzeń spinowych [uzyskanych przy pomocy

dynamicznego współczynnika struktury spinów  $S(q, \omega)$ ] w niskowymiarowej orbitalno-selektywnej fazie Motta.

*Udział autora: Zainicjowałem projekt badawczy. Dostosowałem kod i wykonałem wszystkie symulacje numeryczne. Dokonałem interpretacji wyników badań, m.in. przeprowadziłem szczegółową analizę widm spinowych. Zidentyfikowałem unikalne cechy uporządkowania blokowego i blokowo-spiralnego, istotne dla eksperymentatorów. Współtworzyłem fenomenologiczny efektywny model spinowy dla magnetyzmu blokowego. Napisałem większość tekstu artykułu. Mój wkład w powstanie tej pracy szacuję na  $\sim 70\%$ .*

**[H5] Interaction-induced topological phase transition and Majorana edge states in low-dimensional orbital-selective Mott insulators,**

**J. Herbrych, M. Środa, G. Alvarez, M. Mierzejewski, and E. Dagotto,  
Nat. Commun. 12, 2955 (2021)**

W tej pracy pokazano, że oddziaływanie Coulomba między elektronami w wielopasmowym nadprzewodniku może indukować topologicznie nietrywialny stan kwantowy. Udowodniono, że układ z dostatecznie dużą wartością oddziaływania Hubbarda posiada chiralny porządek magnetyczny, tripletową amplitudę parowania nadprzewodnictwa oraz fermiony Majorany na krawędziach układu.

*Udział autora: Zainicjowałem projekt badawczy. Dostosowałem kod i wykonałem wszystkie symulacje numeryczne. Dokonałem interpretacji wyników badań, m.in. przeprowadziłem analizę elektronowej funkcji widmowej i lokalnej gęstości stanów. Zbudowałem i przetestowałem hipotezę, że topologiczne przejście fazowe jest kontrolowane przez właściwości magnetyczne układu. Przedstawiłem argumenty przemawiające za występowaniem zeroenergetycznych modów Majorany (m.in. zachowanie entropii splątania, pojawienie się tripletowej amplitudy nadprzewodnictwa, pojawienie się w lokalnej gęstości stanów na brzegach systemu). Napisałem większość tekstu artykułu. Mój wkład w powstanie tej pracy szacuję na  $\sim 70\%$ .*

**[H6] Quantum magnetism of iron-based ladders: blocks, spirals, and spin flux,**

**M. Środa, E. Dagotto, and J. Herbrych,  
Phys. Rev. B 104, 045128 (2021)**

Praca przedstawia teoretyczną analizę stanów magnetycznych wieloorbitalnej drabiny Hubbarda w fazie OSMP, tj. przeprowadzono w niej szczegółową analizę wpływu domieszkania oraz oddziaływania na fazy magnetyczne. Przedstawione wyniki wskazują, że wielopasmowe modele układów na bazie żelaza łączą w sobie zjawiska znane z miedzianów (skłonności do antyferromagnetyzmu) z tymi odkrytymi w manganitach (rozdzielenie faz) oraz pniktydach żelaza (magnetyzm bloków).

*Udział autora: Ten projekt został wykonany przez mojego doktoranta (jestem współpromotorem). Zainicjowałem projekt badawczy. Dokonałem interpretacji wyników badań, m.in. dostarczyłem narzędzi analitycznych niezbędnych do przeprowadzenia badań. Zbudowałem hipotezę, że obecność więcej niż jednego wektora Fermiego przyczynia się do nietrywialnych właściwości magnetycznych układu. Opisałem fazy magnetyczne. Napisałem część tekstu artykułu. Mój wkład w powstanie tej pracy szacuję na  $\sim 40\%$ .*

## 2.3 Opis osiągnięcia

### Wprowadzenie

Dotychczasowe doświadczenia z wysokotemperaturowymi (high- $T_c$ ) nadprzewodnikami na bazie miedzi (Cu) wykazały, że analiza układów niskowymiarowych, takich jak łańcuchy i drabiny, może dostarczyć przydatnych informacji do lepszego porównania teorii z eksperymentami [1–3]. Ponadto, postępy dotyczące zimnych atomów w sieciach optycznych [4–11], a także eksperymenty typu “pump-and-probe” w ciele stałym rzucają wyzwanie naszemu zrozumieniu fizyki nierównowagowej. W konsekwencji precyzyjne wyniki w układach o zmniejszonej wymiarowości w dalszym ciągu mają duże znaczenie. Jedną z przyczyn takiego stanu rzeczy jest fakt, że teoretyczne obliczenia w układach silnie skorelowanych cząstek mogą być przeprowadzone dokładnie w jednym wymiarze (1D), szczególnie w sposób numeryczny. W tym kontekście metody oparte o funkcję falową, tj. dokładna diagonalizacja (ED - exact diagonalization), algorytmy na bazie Lanczosa oraz metoda grupy renormalizacji macierzy gęstości (DMRG - density-matrix renormalization group), pozwalają na dokładne obliczenie wielkości statycznych i dynamicznych.

Wyżej wymienione obliczenia są w przeważającym stopniu wykonywane w ramach dwóch paradygmatycznych modeli: w jednopasmowym modelu Hubbarda i w modelu Heisenberga, na różnych sieciach krystalograficznych. Wynika to z faktu, że stan normalny miedzianów (przy braku ciśnienia lub przy połówkowym domieszkowaniu) można opisać przy pomocy izolatora Motta oraz jego fluktuacji magnetycznych [12, 13]. Pomiary nieelastycznego rozpraszania neutronów (INS - inelastic neutron scattering) są kluczowym elementem w badaniu tych ostatnich właściwości. Ta doświadczalna technika dostarcza szczegółowych informacji o pędzie (momentum-resolved) i energii (energy-resolved) wzbudzeń magnetycznych. Znaczenie badań INS zostało najlepiej zobrazowane we wczesnym okresie badań nad nadprzewodnictwem wysokotemperaturowym [13, 14]. Krótco po odkryciu związków tlenku miedzi stało się oczywiste, że teoria BCS (Bardeen–Cooper–Schrieffer) nie opisuje eksperyment. Równocześnie wyniki INS wykazały, że nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe występuje blisko antyferromagnetycznego (AFM) uporządkowania momentów magnetycznych  $S = 1/2$   $\text{Cu}^{2+}$  oraz że nowy mechanizm parowania może być oparty na fluktuacjach magnetycznych [3]. To ostatnie zjawisko można dokładnie opisać przy pomocy modelu Hubbarda (fermiony ze spinem oddziałujące na sieci) bądź, pod pewnymi warunkami, przez model Heisenberga oddziałujących spinów.

Pogląd ten został zakwestionowany przez odkrycie nadprzewodników wysokotemperaturowych na bazie żelaza [15–17]. W porównaniu z materiałami na bazie miedzi, które w normalnym stanie są izolatorami AFM, nadprzewodniki na bazie żelaza (Fe) są zazwyczaj złymi metalami (bad-metals). Pomimo tej fundamentalnej różnicy, diagramy fazowe (zależności  $T_c$  od gęstości elektronowej lub ciśnienia) tych rodzin materiałów są jakościowo podobne [18–20]. W jednopasmowym modelu Hubbarda, oddziaływanie Hubbarda (Coulomba) otwiera przerwę energetyczną na poziomie Fermiego. Ten sam mechanizm prowadzi również do dużego (maksymalnego) momentu magnetycznego  $S^2 = S(S + 1)$  oraz do zaobserwowanego w materiałach na bazie miedzi porządku AFM. W konsekwencji metaliczny stan materiałów na bazie żelaza zakwestionował rolę fluktuacji magnetycznych (lub nawet bardziej ogólnie: roli korelacji elektronowych) w nadprzewodnictwie high- $T_c$ .

Aby zrozumieć pochodzenie powyższego paradoksu, należy skupić się na istotnej różnicy pomiędzy miedzią i żelazem (oba związki należą do metali przejściowych). Miedź posiada w pełni wypełnione orbitale  $3d$  i jeden elektron w paśmie  $4s$  (dając tym samym



średni ładunek w miedzianach blisko jedności). W odróżnieniu od miedzi, żelazo ma wypełnione pasmo 4s oraz 6 elektronów na pięciu orbitalach 3d. W konsekwencji miedziany posiadają pojedynczą powierzchnię Fermiego (FS - Fermi surface), która może być dobrze opisana przez jednopasmowy model Hubbarda. Związki na bazie żelaza posiadają skomplikowaną FS wynikającą z pięciu orbitali 3d. Ta istotna koncepcyjna różnica musi być wzięta pod uwagę w trakcie budowania modeli materiałów na bazie żelaza.

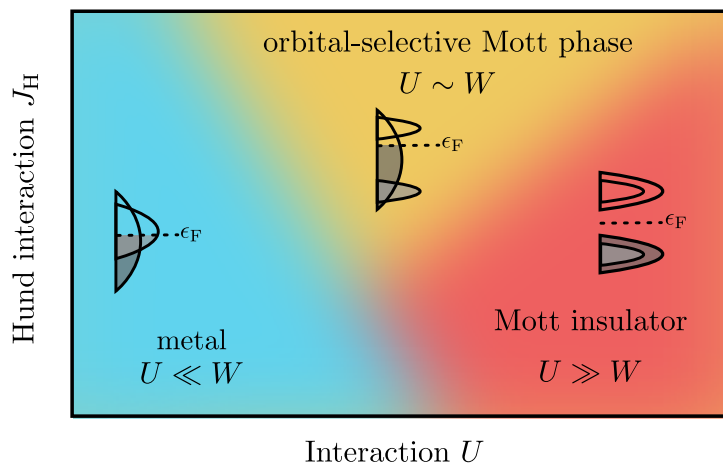
W związku z powyższym, fizykę nadprzewodników na bazie żelaza (oraz materiałów opartych o związki z grupy azotowców) należy opisać przy wykorzystaniu wielopasmowego (wieloorbitalnego) modelu Hubbarda [17, 21] zawierającego nie tylko oddziaływanie Hubbarda, ale również oddziaływanie Hunda. To pierwsze oddziaływanie opisuje odpychanie się elektronów w tym samym orbitalu, drugie zaś uwzględnia regułę Hunda: każdy orbital jest zapełniany pojedynczo zanim dowolny orbital jest zapełniany podwójnie. Równocześnie elektrony w pojedynczo zapełnianych orbitalach posiadają tę samą projekcję spinów i maksymalizują moment magnetyczny  $\mathbf{S}^2$ . Ogólny, wielopasmowy model Hubbarda - posiadający symetrie SU(2) - dany jest przez

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{\gamma, \gamma', \ell, \sigma} t_{\gamma\gamma'} \left( c_{\gamma, \ell, \sigma}^\dagger c_{\gamma', \ell+1, \sigma} + \text{H.c.} \right) + \sum_{\ell, \gamma} \Delta_\gamma n_{\gamma, \ell} \\
 & + U \sum_{\gamma, \ell} n_{\gamma, \ell, \uparrow} n_{\gamma, \ell, \downarrow} + (U - 5J_H/2) \sum_{\gamma < \gamma', \ell} n_{\gamma, \ell} n_{\gamma', \ell} \\
 & - 2J_H \sum_{\gamma < \gamma', \ell} \mathbf{S}_{\gamma, \ell} \cdot \mathbf{S}_{\gamma', \ell} + J_H \sum_{\gamma < \gamma', \ell} \left( P_{\gamma, \ell}^\dagger P_{\gamma', \ell} + \text{H.c.} \right), \quad (1)
 \end{aligned}$$

gdzie  $c_{\gamma, \ell, \sigma}^\dagger$  kreuje elektron z projekcją spinową  $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$  na węźle  $\ell = \{1, \dots, L\}$  i orbitalu  $\gamma = \{0, \dots, \Gamma - 1\}$ , a  $\Gamma$  określa liczbą aktywnych orbitali.  $t_{\gamma\gamma'}$  opisuje macierz przeskoku (w przestrzeni orbitali), a  $\Delta_\gamma$  określa pole krystaliczne. Gęstość ładunku na danym orbitalu dana jest przez  $n_{\gamma, \ell} = \sum_\sigma n_{\gamma, \ell, \sigma}$ ,  $\mathbf{S}_{\gamma, \ell}$  opisuje całkowity spin, a  $P_{\gamma, \ell} = c_{\gamma, \ell, \uparrow} c_{\gamma, \ell, \downarrow}$  określa operator przeskoku par elektronów (pair-hopping).  $U$  to oddziaływanie Hubbarda, podczas gdy  $J_H$  to oddziaływanie Hunda. W pracach opisanych poniżej, aby zmniejszyć liczbę parametrów w modelu,  $J_H/U = 1/4$  będzie zazwyczaj stałą wartością (powszechnie stosowaną przy modelowaniu nadprzewodników na bazie żelaza). Całkowita gęstość elektronowa dana jest przez  $n = N/L$ , gdzie  $N$  to liczba elektronów a  $L$  to rozmiar układu.

Konkurencja między spinowymi, elektronowymi oraz orbitalowymi stopniami swobody w (1) może doprowadzić do nowych, nowych faz niewystępujących w jednopasmowym modelu Hubbarda. Znakomitym przykładem takiego fenomenu - unikalnego dla układów wielopasmowych - jest tzw. orbitalno-selektywna faza Motta (OSMP - orbital-selective Mott phase) [22, 23] (zob. schemat diagramu fazowego przedstawiony na Rys. 1). W jednopasmowym modelu Hubbarda istnieje przejście metal-izolator (przejście Motta-Hubbarda) w funkcji oddziaływania  $U$  (w szczególnym przypadku 1D przerwa energetyczna otwiera się dla dowolnego  $U$ ). W modelach wielopasmowych istnienie wielu stopni swobody prowadzi do selektywnej lokalizacji elektronów na niektórych orbitalach. Takie pasma współistnieją z pasmem (bądź pasmami) metalicznymi z elektronami wędrownymi. Uważa się [16], że ta wyjątkowa mieszanka metal-izolator może odpowiadać za metaliczne właściwości nadprzewodników na podstawie żelaza w stanie normalnym.

Silnie skorelowane układy nadprzewodzące o wysokim  $T_c$ , zarówno na bazie miedzi, jak i żelaza, są ściśle powiązane ze stanem złego metalu i/lub AFM porządkiem magnetycznym. W związku z powyższym poświęcono dużo uwagi korelacjom, zarówno



RYSUNEK 1: Schematyczny diagram fazowy wielopasmowego modelu Hubbarda. Dla  $U \ll W$  (gdzie  $W$  to szerokość energii kinetycznej) system jest metalem. Dla dużej wartości  $U \gg W$  system jest izolatorem w fazie Motta. Dla pośredniej wartości oddziaływania  $U$  i dla skończonej wartości wymiany Hunda  $J_H$  system jest w orbitalno-selektywnej fazie Motta ze zlokalizowanymi elektronami przynajmniej na jednym z orbitali. Schematyczne kształty gęstości stanów elektronowych są również pokazane. Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H4].

elektronów jak i spinów. W tym kontekście właściwości magnetyczne układów wielopasmowych są o wiele mniej zbadane. Wynika to z kilku faktów: (i) nadprzewodnictwo na bazie żelaza jest znacznie młodsze w porównaniu do nadprzewodnictwo na bazie miedzi. (ii) Momenty magnetyczne w jednopasmowym modelu Hubbarda nie są jeszcze w pełni rozwinięte w fazie metalicznej (przy małym  $U$ ). W konsekwencji właściwości magnetyczne stanu złego metalu materiałów na bazie żelaza były (często błędnie) pomijane w analizie problemu. (iii) Brak dokładnych metod numerycznych, które mogą w dokładny sposób opisać silnie skorelowany układ o dużej przestrzeni Hilberta.

Wspólnym celem publikacji zgłoszonych jako "osiągnięcia naukowe" [H1-H6] jest opisanie magnetyzmu oraz zjawisk transportu (zarówno spinu, jak i ładunku) niskowymiarowych układów wielopasmowych, w szczególności w orbitalno-selektywnej fazie Motta. Istnienie fazy OSMP zostało pokazane - przy pomocy kątowno-rozdzielczej spektroskopii fotoemisyjnej (ARPES - angle-resolved photoemission spectroscopy) dla różnych dwuwymiarowych związków na bazie żelaza z rodziny 122 ( $A\text{Fe}_2\text{X}_2$ ; A - metale alkaliczne, X - chalkogenki), np.  $(\text{K,Rb})_x\text{Fe}_2\text{Se}_2$  [24] oraz  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  [25] bądź chalkogenków i oksychalkogenków żelaza, takich jak  $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$  [26] oraz  $\text{La}_2\text{O}_2\text{Fe}_2\text{O}(\text{Se,S})_2$  [27]. Ponadto, eksperymentalne wyniki na niskowymiarowych materiałach z rodziny 123 (kwazi-1D drabiny) wykazują interakcję pomiędzy momentami magnetycznymi a elektronami na orbitalu metalicznym, np.  $\text{BaFe}_2\text{S}_3$  oraz  $\text{BaFe}_2\text{Se}_3$  [23, 28–32]. Co istotne, te ostatnie mogą również wspierać stan nadprzewodnictwa [33–37] w podobny sposób do tego występującego w drabinach na bazie miedzi.

Eksperymentalne badania właściwości magnetycznych związków z rodziny 123 odkryły dwie (główne) fazy magnetyczne. INS na  $(\text{Ba,K})\text{Fe}_2\text{S}_3$  oraz  $(\text{Cs,Rb})\text{Fe}_2\text{Se}_3$  zidentyfikowało [28, 38–40] porządkowanie ferromagnetyczne (FM) wzdłuż szczybli drabiny oraz porządkowanie AFM wzdłuż nóg, tj. kanoniczne porządkowanie  $(\pi, 0)$ . Interesujący jest fakt, że badania związku  $\text{BaFe}_2\text{Se}_3$  wykazały [41] egzotyczny układ FM "wysp

spinowych” sprzęgniętych AFM wzdłuż nóg, a mianowicie  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ , czyli tzw. uporządkowanie bloków magnetycznych [z wektorem uporządkowania  $(\pi/2, 0)$ ]. Do takich samych wniosków doprowadziły badania dyfrakcji neutronów [42–44] lub promieniowania rentgenowskiego [44] oraz spektroskopia mionów [44]. Podobne struktury magnetyczne zidentyfikowano również w dwuwymiarowych materiałach z uporządkowaniem  $\sqrt{5} \times \sqrt{5}$  dziur w  $(\text{K,Rb})\text{Fe}_2\text{Se}_2$  [45–48], w związkach żelaza z rodziny  $245 (\text{K,Rb})_2\text{Fe}_4\text{Se}_5$  [49, 50], a także w chalkogenkach żelaza  $\text{Fe}(\text{Se,Te})$  [51, 52]. Co więcej, obliczenia teorii funkcjonału gęstości pokazały, że magnetyzm blokowy może być również istotny dla jednowymiarowego związku żelaza i selenku  $\text{Na}_2\text{FeSe}_2$  [53], chalkogenku żelaza  $\text{Ce}_2\text{O}_2\text{FeSe}_2$  [54] oraz drabin tellurków żelaza, które dopiero będą zsyntetyzowane [55, 56].

Dokładna diagonalizacja układów wielopasmowych jest niemożliwa ze względu na wykładniczy wzrost przestrzeni Hilberta modelu (1),  $\dim(H) = 4^{\Gamma L}$ , z  $\Gamma$  jako liczbą aktywnych orbitali oraz  $L$  jako ilością węzłów w układzie. Aby zbadać fizykę takich układów, należy polegać na pewnej formie przybliżeń. Dla przykładu, pełny pięciorbitalowy model Hubbarda został zbadany przy pomocy średniego pola Hartree-Focka (mean-field Hartree-Fock) [57–59]. Badania te ujawniły skomplikowany magnetyczny diagram fazowy w funkcji oddziaływań Hunda oraz Hubbarda z wieloma konkurującymi fazami. Wiele z tych faz zostało również potwierdzonych przez teorię funkcjonału gęstości [36, 37, 55, 56, 59–61] (DFT - density functional theory). Ponadto, właściwości elektronowe wielopasmowego modelu Hubbarda były dokładnie zbadane przy pomocy dynamicznej teorii pola średniego (dynamical mean-field theory) [16, 22, 62].

Wyżej wymienione podejścia teoretyczne są ograniczone przez ich niezdolność do poprawnego opisanie fluktuacji kwantowych na dużych odległościach. Problem ten jest szczególnie ważny dla układów niskowymiarowych (np. dla drabin żelaza z rodziny 123), gdzie potrzebne jest dokładne uwzględnienie efektów kwantowych, co tym samym wymaga pełnych obliczeń wielociałowych. By ułatwić takie obliczenia, należy wybrać inną ścieżkę, jak np. zmniejszenie liczby rozważanych orbitali. Dla przykładu: wykazano [21], że trójorbitalowy model Hubbarda może dokładnie opisać fizykę materiałów na bazie żelaza. W tym ostatnim, orbitale  $e_g$  ( $d_{x^2-y^2}$  oraz  $d_{z^2}$ ) są wystarczająco daleko od poziomu Fermiego, aby można je było pominać, przez co tylko orbitale  $t_{2g}$  ( $d_{xy}$ ,  $d_{xz}$ ,  $d_{yz}$ ) są aktywne. Należy też odpowiednio zmniejszyć liczbę rozważanych elektronów. Rozszczepienie w kompleksach o geometrii oktaedrycznej, obecne w drabinach żelaza z rodziny 123, prowadzi do tzw. stanu wysokiego spinu (maksymalnej projekcji spinowej) z 2 elektronami na orbitalach  $e_g$ . W konsekwencji tylko 4 elektrony na trzech orbitalach  $t_{2g}$  tworzą poziom Fermiego. Należy jednak pamiętać, że pomimo tych przybliżeń dokładne symulacje wielociałowe dla układów trójorbitalowych są w większości ograniczone do geometrii łańcucha oraz wielkości statycznych, zaś drabiny i wielkości dynamiczne (zależne od częstotliwości/energii) są w dużym stopniu poza zasięgiem.

Jak omówiono wyżej, w celu dokładnego opisanie właściwości wielopasmowego modelu Hubbarda potrzebny jest duży wysiłek numeryczny. Wszystkie wyniki omawiane w niniejszej pracy zostały pozyskane przy pomocy metody grupy renormalizacji macierzy gęstości (DMRG) z podejściem jednego węzła centralnego [63–66]. Dynamiczne funkcje korelacji zostały obliczone przy pomocy metody dynamicznego-DMRG [67–69], tj. obliczenia są realizowane bezpośrednio w przestrzeni częstości przy pomocy iteracji Kryłowa [69, 70]. Ponadto, wszystkie wyniki otrzymano dla dość ogólnych wartości parametrów kinetycznych hamiltonianu (1), tj. współlistniejących szerokich i wąskich pasm energetycznych w  $U \rightarrow 0$  (zgodnie z obliczeniami DFT dla materiałów z rodziny 123 [21, 71]). Dla trójorbitalowego  $\Gamma = 3$  oraz dwuorbitalowego  $\Gamma = 2$  modelu Hubbarda

użyto macierz przeskoku o wartości

$$t_{\gamma\gamma'} = \begin{pmatrix} -0.50 & 0.00 & 0.10 \\ 0.00 & -0.50 & 0.10 \\ 0.10 & 0.10 & -0.15 \end{pmatrix}, \quad t_{\gamma\gamma'} = \begin{pmatrix} -0.50 & 0.00 \\ 0.00 & -0.15 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

oraz pola krystalicznego  $\Delta_0 = -0.1$ ,  $\Delta_1 = 0.0$ ,  $\Delta_2 = 0.8$  lub  $\Delta_0 = 0.0$ ,  $\Delta_1 = 0.8$ .

### Statyczne właściwości spinów

Właściwości magnetyczne układów kwantowych są zazwyczaj badane przy pomocy statycznego współczynnika struktury spinowej  $S(q)$ , tj. poprzez transformatę Fouriera dalekozasięgłych funkcji korelacji spinowej

$$S(q) = \frac{1}{L} \sum_{\ell, m} e^{-iq(\ell-m)} \langle \mathbf{S}_\ell \cdot \mathbf{S}_m \rangle, \quad (3)$$

gdzie  $L$  to rozmiar układu (łańcuch 1D z  $L$  węzłami) oraz  $q = 2\pi m/L$  z  $m = 0, \dots, L-1$  to wektor falowy (pęd). Należy zauważyć, że  $\mathbf{S}_\ell = \sum_\gamma \mathbf{S}_{\gamma, \ell}$  przedstawia całkowity spin na węźle. Dla kanonicznego porządkowania AFM maksymalny współczynnik struktury  $S(q)$  jest dla wektora falowego  $q_{\max} = \pi$  (dla FM jest on dla  $q_{\max} = 0$ ). Analiza 1D trójorbitalowego modelu Hubbarda w OSMP wykazała [71], że układ ten posiada blokowo-magnetyczne porządkowanie (układ spinów  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ ) z  $q_{\max} = \pi/2$  dla oddziaływania rzędu  $U \sim J_H \sim W$  (gdzie  $W$  to szerokość energii kinetycznej systemu) oraz gęstości elektronowej  $n = 4/3$ . Co ciekawe, wynik ten został później potwierdzony [41] przez analizę wyników INS dla proszku  $\text{BaFe}_2\text{Se}_3$ .

Dla wyżej wymienionego modelu jeden z orbitali jest w pełni zlokalizowany z  $n_2 = 1$ , zaś pozostałe dwa mają metaliczny charakter z  $n_0 \simeq n_1 \simeq 1.5$  (dając łącznie 4 elektrony). W Ref. [H2] model ten został uproszczony poprzez pominięcie jednego z metalicznych orbitali (razem ze zmniejszeniem ogólnej ilości elektronów do 2.5 elektronu na węzeł). Takie uproszczenie bazuje na fakcie, że orbitale  $d_{yz}$  oraz  $d_{xz}$  często są bliskie degeneracji w materiałach  $\text{AFe}_2\text{X}_3$ . Taki wynik jest zgodny z przewidywaniami teorii pola krystalicznego, np. dla  $\text{BaFe}_2\text{Se}_3$  [41]. Rozszczepienie w kompleksach o geometrii oktaedrycznej tych materiałów (ligandy są "odciągane" od centralnego atomu w komórce) może przyczynić się do powstania dwóch niemal zdegenerowanych pasm oraz jednego pasma o wyższej energii. Takie zachowanie może być modelowane przez odpowiednie dobranie wartości pola krystalicznego  $\Delta_\gamma$  [21, 71]. Co ciekawe, analiza modelu dwuorbitalowego, tj. zależności obsadzenia na poszczególnych orbitalach w funkcji oddziaływania  $U$  oraz całkowitej gęstości  $n$  przedstawiona w Ref. [H2], potwierdza skuteczność takiego modelu w fazie OSMP.

W Ref. [H2] pokazano, że dwuorbitalowy model Hubbarda z gęstością elektronów powyżej połówkowego wypełnienia zawsze przejawia oznaki OSMP (m.in. z powodu istnienia pola krystalicznego  $\Delta_1 = 0.8$  [eV], zgodnie z sugestią obliczeń DFT dla rodziny 123). W konsekwencji, w szerokim zakresie gęstości elektronowej  $2 < n < 3$  układ posiada jedno zlokalizowane pasmo z  $n_1 = 1$  oraz jeden metaliczny orbital z częściowym wypełnieniem  $1 < n_0 < 2$  (oraz  $n = n_0 + n_1$ ). Należy zauważyć, że dla  $U > W$  oraz  $n = 2$  (połówkowe wypełnienie) układ znajduje się w pełnej fazie Motta z uporządkowaniem AFM oraz  $\mathbf{S}^2 = S(S+1) = 2$ . Z drugiej strony, dla  $n = 3$  układ posiada zarówno pasmo z izolatorem Motta z  $n_1 = 1$ , jak i pasmo z izolatorem pasmowym z  $n_0 = 2$  oraz uporządkowaniem AFM z  $\mathbf{S}^2 = 3/4$ . Dla pośrednich wartości  $2 < n < 3$ ,  $\mathbf{S}^2$  jest również maksymalne, z wartością zależną od  $n$ . Maksymalne  $\mathbf{S}^2$ , jednostkowe obsadzenie  $n_1 = 1$ , zanik fluktuacji ładunku  $\delta n_\gamma^2 = \langle n_\gamma^2 \rangle - \langle n_\gamma \rangle^2$  na orbitalu  $\gamma = 1$ , płaska (niezależna od

wektora falowego) funkcja dystrybucji pędu  $n(q)$  oraz szczelina energetyczna w elektro-  
nowej funkcji spektralnej  $A(q, \omega)$  dla  $\gamma = 1$  (zob. rów. późniejszą dyskusję) wskazują  
na to, że układ znajduje się w orbitalo-selektywnej fazie Motta. Co więcej, wyżej wspo-  
mniane zachowanie zlokalizowanego orbitalu  $\gamma = 1$  wskazuje na to, że podwójne obsa-  
dzenia i dziury nie wnoszą wkładu do fizyki niskich energii (blisko poziomu Fermiego)  
i mogą być usunięte przez transformację Schrieffer-Wolffa [72] [ograniczoną do orbitala  
 $\gamma = 1$  w (1)]. W związku z powyższym w Ref. [H2] pokazano, że efektywny model  
OSMP można zapisać w formie uogólnionego modelu Kondo-Heisenberga (gKH)

$$H_K = - t_{00} \sum_{\ell, \sigma} \left( c_{0, \ell, \sigma}^\dagger c_{0, \ell+1, \sigma} + \text{H.c.} \right) + U \sum_{\ell} n_{0, \ell, \uparrow} n_{0, \ell, \downarrow} \\ + K \sum_{\ell} \mathbf{S}_{1, \ell} \cdot \mathbf{S}_{1, \ell+1} - 2J_H \sum_{\ell} \mathbf{S}_{0, \ell} \cdot \mathbf{S}_{1, \ell}. \quad (4)$$

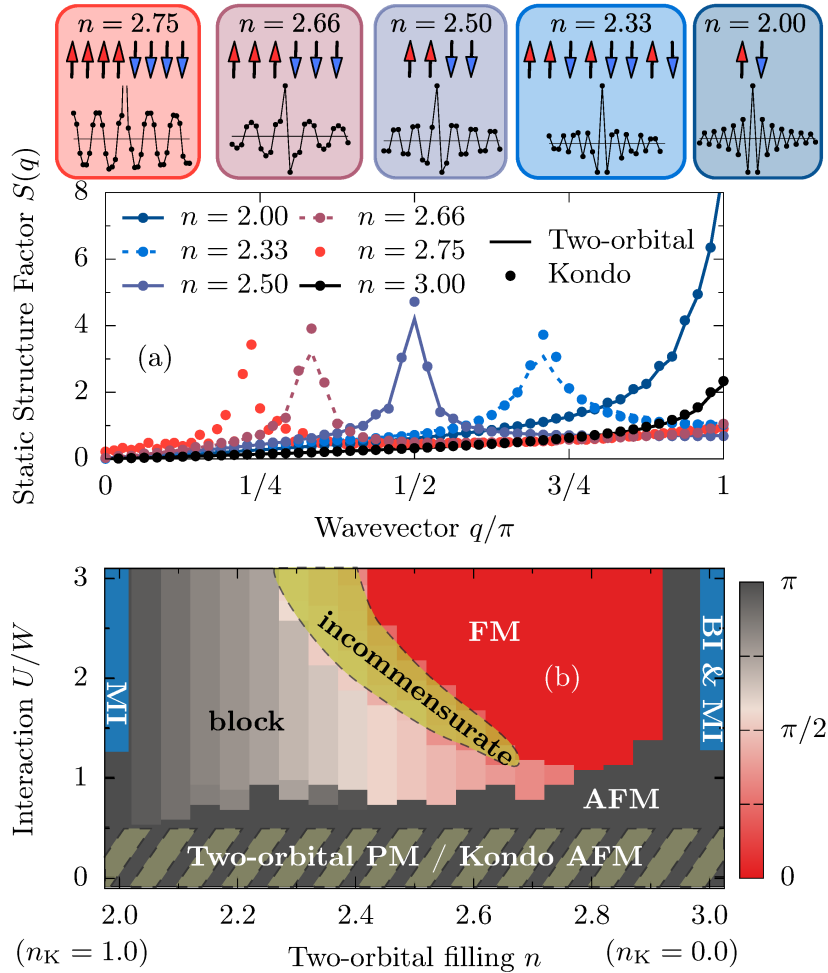
Pierwsze dwa wyrazy powyższego modelu opisują zdelokalizowane elektrony w paśmie  
metalicznym  $\gamma = 0$ . Trzeci wyraz opisuje zachowanie spinów  $\mathbf{S}_{1, \ell}$  zlokalizowanych elek-  
tronów  $\gamma = 1$  z całą wymianą daną przez  $K = 4t_{11}^2/U$ . Ostatni wyraz opusuje oddzia-  
ływanie Hunda pomiędzy spinami na różnych orbitalach. Należy zauważyć, że gęstość  
elektronowa efektywnego modelu wynosi  $n_K = n - 1$  lub  $n_K = 3 - n$  ze względu na sy-  
metrię cząstka-dziura modelu (4).

Dokładność efektywnego modelu  $H_K$  (4) została sprawdzona na różnych statycznych  
i dynamicznych wielkościach: (i) statyczny współczynnik struktury  $S(q)$  został porów-  
nany z wynikami otrzymanymi przy pomocy pełnego, dwuorbitalowego modelu (1)  
w Ref. [H2]. (ii) Jednocząstkowa funkcja spektralna  $A(q, \omega)$  została porównana z tym  
modelem w Ref. [H3]. (iii) Współczynnika struktury dynamicznej  $S(q, \omega)$  został porów-  
nany z wynikami dwu- i trójorbitalowymi z Ref. [H1] w Ref. [H4]. Dla wszystkich tych  
wielkości efektywny model prawidłowo opisywał zachowanie pełnego hamiltonianu (1),  
zarówno jakościowo jak i ilościowo. Ponadto, z powodu ograniczonej (mniejszej) prze-  
strzeni Hilberta w (4) możliwe było uzyskanie bardziej precyzyjnych wyników.

Na Rys. 2(a) przedstawiono porównanie współczynnika struktury statycznej  $S(q)$  po-  
między (1) z  $\Gamma = 2$  oraz (4) dla  $U/W = 1$  (z  $W = 2.1$  [eV]). Zgodnie z oczekiwaniami,  
układ przejawia porządkowanie AFM z  $q_{\max} = \pi$  dla  $n = 2$  ( $n_K = 1$ ), tj. naprzemienne  
korelacje  $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$  [przedstawione również na górnym panelu na Rys. 2(a)]. Wraz z do-  
mieszkowaniem elektronów dochodzi do stabilizacji blokowego magnetyzmu  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$   
z  $q_{\max} = \pi/2$  dla  $n = 2.5$  ( $n_K = 0.5$ ). Należy zauważyć, że wyniki te są zgodne z rozwa-  
żaniami trójorbitalowymi [71] z powodu degeneracji metalicznych orbitali w opisywanym  
modelu ( $n = n_0 + n_1 + n_2 = 1.5 + 1.5 + 1$ ). Dodatkowo, w Ref. [H2] odkryto nowe ro-  
dzaje bloków magnetycznych. Dla gęstości elektronowej  $n = 2.66$  ( $n_K = 0.33$ ) znaleziono  
uporządkowanie  $\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow$  z  $q_{\max} = \pi/3$ . Dodatkowo, ze względu na większe roz-  
miary układów  $L$  numerycznie dostępnych dla (4) odkryto magnetyzm blokowy na czte-  
rech węzłach z  $q_{\max} = \pi/4$  dla  $n_K = 0.25$ .

Tendencje do formowania magnetyzmu blokowego w OSMP można zrozumieć z gra-  
nicznych zachowań modelu gKH (4):

- (i) dla  $t_{00} \gg (U, J_H)$ : układ znajduje się w stanie paramagnetycznym (PM) z krótko-  
zasięgowymi cechami w  $S(q)$  przy  $q = 2k_F$  (tzw. niestabilność Fermiego), gdzie  $k_F$   
to wektor Fermiego zależny ilości elektronów w systemie  $2k_F = \pi n_K$  (dla geometrii  
łańcucha w limicie  $U \rightarrow 0$ ),
- (ii) dla  $J_H \gg (t_{00}, U)$ : elektrony z pasma metalicznego formują lokalne triplety ze zlo-  
kalizowanymi spinami (ze względu na FM oddziaływanie Hunda),



RYSUNEK 2: (a) Statyczny współczynnik struktury  $S(q)$  dla różnych wartości obsadzeń  $n$  oraz  $U/W = 1$  dla dwuorbitalowego modelu Hubbarda (linie) oraz uogólnionego modelu Kondo-Heisenberga (punkty). Funkcje korelacji spinowej  $\langle \mathbf{S}_\ell \cdot \mathbf{S}_{L/2} \rangle$  w reprezentacji położeniowej oraz schematy uporządkowań spinów są pokazane na górze wykresu. (b) Magnetyczny diagram fazowy w funkcji oddziaływania  $U$  oraz gęstości  $n$  dla uogólnionego modelu Kondo-Heisenberga. Obszar z zacieniowaną przerywaną linią reprezentuje region, w którym mapowanie nie jest prawidłowe. Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H2].

- (iii) dla  $J_H \sim t_{00} \gg U$ : zwiększanie mobilność elektronów prowadzi do FM uporządkowania (znanego z modelu Kondo) przez mechanizm podwójnej wymiany (double exchange mechanism) [73],
- (iv) dla  $J_H \sim U \sim W$ : oddziaływanie Hubbarda  $U$  promujące AFM uporządkowanie konkuruje z uporządkowaniem FM wywołanym mechanizmem podwójnej wymiany. Na skutek tego układ minimalizuje swoją energię poprzez formowanie wysp FM, które oddziałują AFM. Innymi słowami, oddziaływanie Hubbarda  $U$  "stabilizuje niestabilność Fermiego" i promuje  $q_{\max} = 2k_F$  jako uporządkowanie (kwazi-)dalekozasięgowe.

Należy zauważyć, że egzotyczny magnetyzm blokowy znaleziony w wielopasmowych łańcuchach i drabinach (opisany odpowiednio w Ref. [H2] oraz Ref. [H5]) nie jest statyczny tak jak to bywa dla ścian domenowych lub fal gęstości spinowej, ale przejawia

wyraźne lokalne fluktuacje kwantowe z  $\langle \mathbf{S}_\ell^z \rangle = 0$ . Dla przykładu, w przypadku uporządkowania  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ , dokładna diagonalizacja Lanczosa przedstawiona w Ref. [H1] pokazuje, że wielociałowy stan podstawowy (many-body ground-state) jest w 50% w formie singletu  $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$ . Dlatego poszczególne bloki magnetyczne powinny być uznawane za regiony z silnymi korelacjami FM i brakiem lokalnej magnetyzacji, które stanowią przeciwieństwo domen ze skończoną magnetyzacją.

Uogólniony model Kondo-Heisenberga pozwala na szczegółową analizę  $S(q)$  dla różnych parametrów. Rys. 2(b) przedstawia jeden z głównych wyników Ref. [H2], tj. diagram faz magnetycznych w funkcji oddziaływania  $U$  oraz gęstości elektronowej  $n$  w 1D OSMP. Dla  $U < W$  stan podstawowy jest paramagnetycznym metalem. Dla  $U \gtrsim W$ , układ jest w fazie OSMP ze współistniejącymi pasmami metalicznymi i izolującymi pasmami Motta. Dla wystarczająco dużych wartości oddziaływania  $U \gg W$ , układ jest w stanie FM dla wszystkich  $n$  [zgodnie z przewidywaniem  $J_H \gg t_{00}$  z punktu (iii) powyżej]. Układ jest w stanie magnetyzmu blokowego gdy  $U \sim W$ , a mianowicie gdy wszystkie skale energii konkurują ze sobą. W zależności od wypełnienia pasma metalicznego  $n_K$ , spiny tworzą różnych rozmiarów FM wyspy które są sprzęgnięte AFM ze sobą. W Ref. [H2] zostało potwierdzone, że wartość  $q_{\max}(n)$  podąża za wartością  $2k_F$  pozyskaną jako maksimum  $dn(q)/dq$ , tj. poprzez punkt zakrzywienia funkcji dystrybucji pędu. Co ciekawe, te przewidywania sprawdzają się również dla trójorbitowego modelu Hubbarda oraz dla systemów o geometrii drabiny (omawianych niżej oraz w Ref. [H5]).

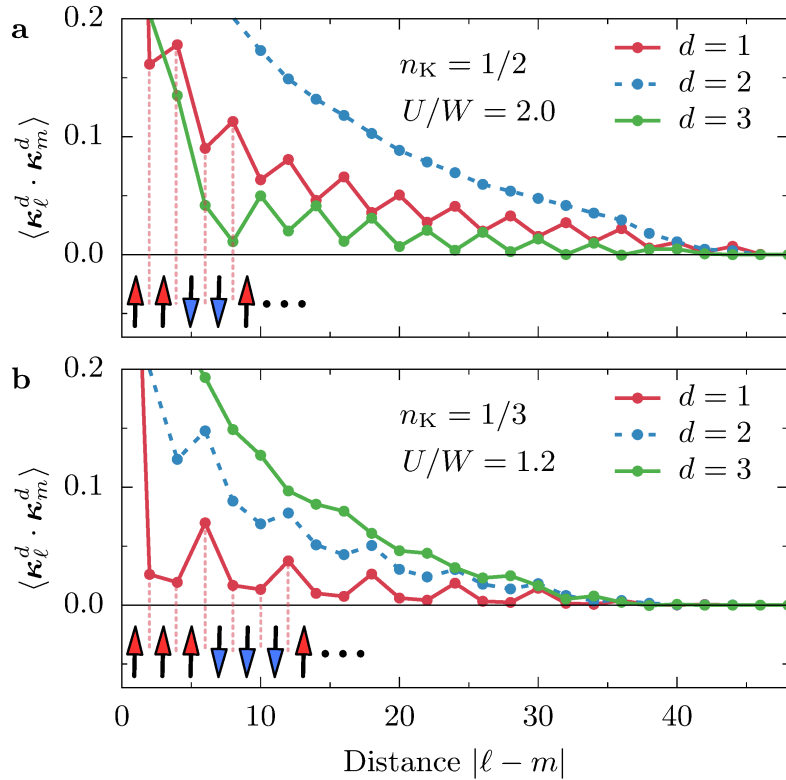
Wstępne badanie przedstawione w Ref. [H2] zidentyfikowało niewspółmierny porządek magnetyczny między fazą blokową i fazą FM [zob. Rys. 2(b)]. Bardziej szczegółowa analiza tego obszaru przedstawiona w Ref. [H3] ujawniła kolejne egzotyczne uporządkowanie magnetyczne. Dodatkowe informacje o właściwościach magnetycznych można pozyskać z tzw. funkcji korelacji chiralności  $\tilde{\kappa}^d(|\ell - m|) = \langle \kappa_\ell^d \cdot \kappa_m^d \rangle$ , gdzie

$$\kappa_\ell^d = \mathbf{S}_\ell \times \mathbf{S}_{\ell+d}. \quad (5)$$

Oczywistym jest, że wartość oczekiwana powyższej funkcji zawsze wynosi zero dla uporządkowań AFM i FM oraz blokowego, ponieważ spiny w takich konfiguracjach zawsze są równoległe lub antyrównoległe.

Korelacja  $\langle \kappa_\ell^d \cdot \kappa_m^d \rangle$  w obszarze wstępnie oznaczonym jako “niewspółmierny” posiada skończoną wartość i w dużym stopniu zależy od wybranej odległości  $d$  między spinami, co wyraźnie widać na wynikach przedstawionych na Rys. 3. Skończona wartość  $\tilde{\kappa}^d(|\ell - m|)$  oznacza, że spiny posiadają spiralny porządek (chiralność) z pewnym kątem obrotu  $\theta$ . Ponadto, struktura przestrzenna  $\langle \kappa_\ell^1 \cdot \kappa_m^1 \rangle$  posiada oscylacje między najbliższymi spinami ( $d = 1$ ). Aby lepiej zbadać wewnętrzną strukturę spirali, na Rys. 3 pokazana jest zależność korelacji chiralności od odległości  $d$ . W szczególności funkcja korelacji  $\tilde{\kappa}^1$  dla  $n_K = 0.5$  ( $n_K = 0.33$ ) oscyluje pomiędzy dwoma (trzema) węzłami. Kształty funkcji chiralności zmieniają swoją charakterystykę, jeśli weźmie się pod uwagę spiny oddalone o  $d = 2$  węzły: (i) wartości chiralności wzrastają  $\langle \kappa_\ell^2 \cdot \kappa_m^2 \rangle > \langle \kappa_\ell^1 \cdot \kappa_m^1 \rangle$  oraz (ii) w przypadku gęstości  $n_K = 0.5$ ,  $\tilde{\kappa}^2$  stają się gładką funkcją odległości, podczas gdy wynik dla  $n_K = 0.33$  wciąż przejawia pewne oscylacje co trzy węzły. Analiza kolejnej odległości  $d = 3$  daje dodatkowe wskazówki. Chociaż korelacje chiralności  $d = 3$  dla gęstości  $n_K = 0.5$  są mniejsze niż  $d = 1$  oraz  $d = 2$ , dla  $n_K = 0.33$  są one większe oraz są gładką funkcją odległości (podobnie jak  $d = 2$  dla  $n_K = 0.5$ ).

To pozornie chaotyczne zachowanie korelacji  $\langle \kappa_\ell^d \cdot \kappa_m^d \rangle$  wraz z zmieniającą się odległością  $d$  nie może być wyjaśnione przez zwykłą zmianę kąta nachylenia  $\theta$  spiralnego



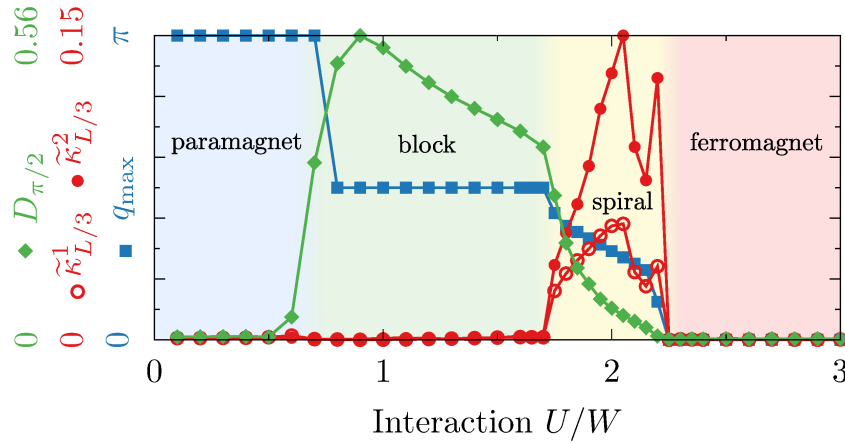
RYSUNEK 3: (a) Zależność funkcji korelacji chiralności  $\langle \kappa_\ell^d \cdot \kappa_m^d \rangle$  ( $\kappa_\ell^d = \mathbf{S}_\ell \times \mathbf{S}_{\ell+d}$ ) od odległości  $d$  między spinami. Wyniki otrzymano przy pomocy uogólnionego modelu Kondo-Heisenberg dla  $n_K = 0.5$  oraz  $U/W = 2.0$ . Panel (b): podobnie jak (a) ale dla  $n_K = 0.33$  oraz  $U/W = 1.2$ . Na obu panel zaprezentowano schematy uporządkowania spinów dla danej gęstości. Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H3].

uporządkowania magnetycznego. Aby lepiej wyjaśnić to zachowanie, skupmy się na korelacji dimerowej [74], danej przez

$$D_{\pi/2} = \frac{2}{L} \sum_{\ell=L/4}^{3L/4} (-1)^{\ell-1} \langle \mathbf{S}_\ell \cdot \mathbf{S}_{\ell+1} \rangle. \quad (6)$$

Powyższa wielkość porównuje liczbę wiązań FM i AFM w układzie. Każde najbliższe wiązanie dla idealnych uporządkowanych FM lub AFM posiada ten sam znak: dodatni dla FM  $\uparrow\uparrow$  oraz ujemny dla AFM  $\uparrow\downarrow$ . W konsekwencji otrzymamy  $D_{\pi/2} = 0$ . Z drugiej strony, w stanie  $\pi/2$ -blokowym  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  wiązania FM oraz AFM naprzemiennie się zmieniają, co prowadzi do  $D_{\pi/2} \neq 0$ . Rys. 4 przedstawia zależność  $D_{\pi/2}$  od oddziaływania  $U$  dla  $n_K = 0.5$ . Ponadto na tym samym rysunku przedstawiono wartość wektora falowego  $q_{\max}$ , dla którego współczynnik struktury statycznej  $S(q)$  jest zmaksymalizowany oraz wartość funkcji korelacji chiralności  $\tilde{\kappa}^d(L/3)$  dla  $d = 1$  oraz  $d = 2$ . Dla małych wartości  $U < W$  (w fazie paramagnetycznej) zarówno  $D_{\pi/2}$ , jak i  $\tilde{\kappa}^d(L/3)$  znikają, a  $q_{\max} = \pi$  odzwierciedla krótkozasięgowy porządek AFM. Podobnie dla  $U \gg W$ ,  $D_{\pi/2} = \tilde{\kappa}^d(L/3) = 0$ , konsekwencja standardowego FM uporządkowania z  $q_{\max} = 0$ . W najciekawszym przypadku konkurujących oddziaływań  $U \sim W$ , korelacja dimerowa  $D_{\pi/2}$  ma skończoną wartość, zmaksymalizowaną dla  $U \simeq W$ . Takie zachowanie odzwierciedla idealny stan blokowy  $\pi/2$ . Można także zauważyć ciągłe przejście  $D_{\pi/2}$  pomiędzy fazą blokową a fazą FM dla takich samych wartości  $U$ , dla których występuje

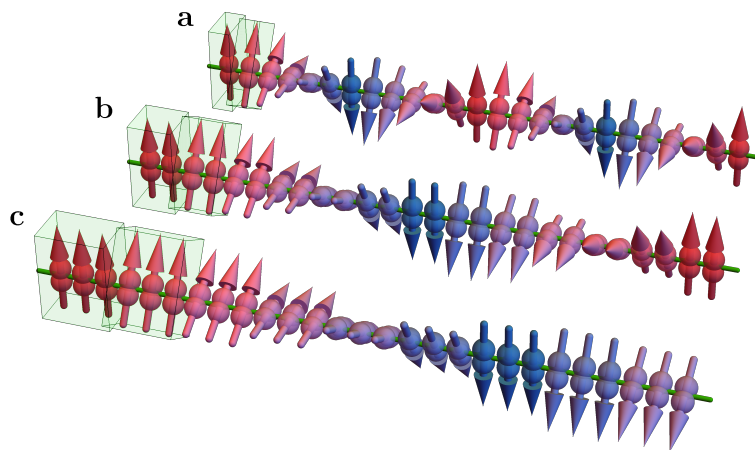




RYSUNEK 4: Diagram fazowy w funkcji oddziaływania  $U/W$ . Zaprezentowane są: (i) pozycja maksimum  $q_{\max}$  statycznego współczynnika struktury  $S(q)$  (kwadraty), (ii) funkcja korelacji chiralności  $\tilde{\kappa}_{L/3}^d$  najbliższych- ( $d = 1$ ) oraz następnych-do-najbliższych ( $d = 2$ ) węzłów (odpowiednio otwarte oraz wypełnione okrągłe punkty), oraz (iii) korelacje dimerów  $D_{\pi/2}$  (diamenty). Wyniki otrzymano przy pomocy uogólnionego modelu Kondo-Heisenberg dla  $n_K = 0.5$ . Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H3].

skończona wartość funkcji chiralności  $\tilde{\kappa}^d(L/3) \neq 0$  oraz gdzie  $q_{\max}$  przyjmuje niewspółmierne wartości.

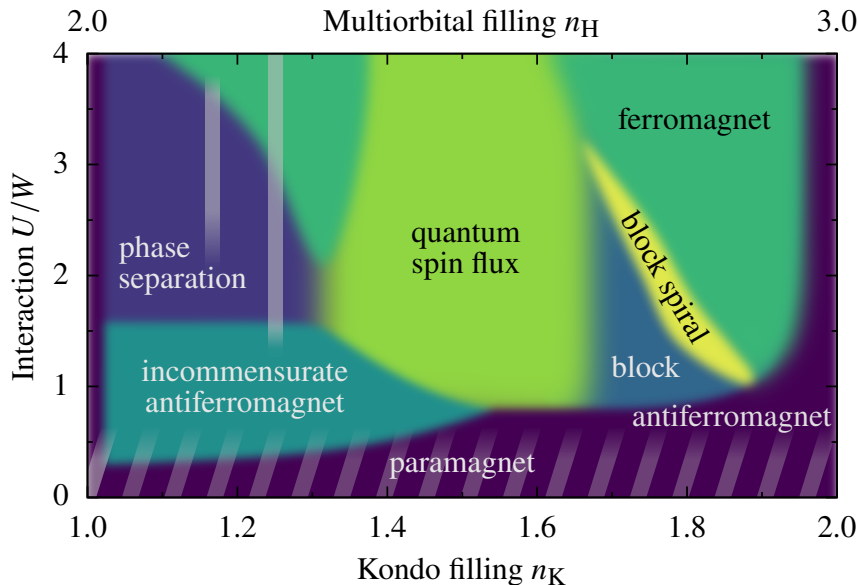
Na podstawie powyższych wyników, Ref. [H3] przedstawia spójny obraz wyjaśniający charakterystykę stanu magnetycznego pomiędzy blokową fazą a FM. Rozważmy najpierw gęstość  $n_K = 0.5$ . Stan podstawowy przy  $U \simeq W$  posiada magnetyzm blokowy, gdzie dwuwęzłowe FM wyspy (bloki) są sprzęgnięte ze sobą AFM. Zwiększenie oddziaływania  $U$  sprawia, że spiny zaczynają się obracać względem siebie i powodują skończone korelacje w  $\langle \kappa_\ell^d \cdot \kappa_m^d \rangle$ . Co niezwykle, w trakcie rotacji ogólny charakter wysp FM zostaje zachowany, co daje skończone  $D_{\pi/2} \neq 0$  aż do stanu FM dla  $U \gg W$ . Taki



RYSUNEK 5: Schematyczne przedstawienie spiral w orbitalno-selektywnej fazie Motta. Od góry do dołu: (a) standardowa struktura spirali magnetycznej z rotacją spinów od węzła do węzła i (b,c) spirale blokowe z, odpowiednio, dwoma i trzema węzłami.

scenariusz jest również widoczny w nierównościach  $\tilde{\kappa}_{L/3}^2 > \tilde{\kappa}_{L/3}^1$  oraz  $\tilde{\kappa}_{L/3}^2 > \tilde{\kappa}_{L/3}^3$  [zob. Fig. 3(a)]. Opisany wyżej porządek magnetyczny znacząco się różni od zwykłego stanu spiralnego, w którym spiny obracają się z węzła na węzeł. W przypadku omawianym w Ref. [H3] spirala składa się z poszczególnych bloków i to cały blok (w przybliżeniu) się obraca (zob. Fig. 5). Należy zwrócić uwagę, że stan blokowo-spiralny jest znaleziony bez żadnej frustracji w hamiltonianie, co jest standardowym mechanizmem stabilizowania takiego uporządkowania, np. w multiferroikach. Te same argumenty można zastosować dla  $\pi/3$  bloków  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  oraz korelacji chiralności na odległości  $d = 3$ .

Prace [H2] oraz [H3] omawiają właściwości orbitalno-selektywnych izolatorów Motta na jednowymiarowym łańcuchu. Ponieważ rodzina materiałów 123 na bazie żelaza jest kwazi-jednowymiarowa (są drabinami ze skończoną całkowitą przeskoku między łańcuchami), w Ref. [H6] uzupełniono badania OSMP o szczegółową analizę porządków magnetycznych w fazie OSMP wielopasmowych drabin Hubbarda. Wyniki zostały podsumowane na Rys. 6. Jak opisano wcześniej, kształt i rozmiar bloków magnetycznych jest powiązany z gęstością elektronową poprzez wektor Fermiego. Ponieważ drabiny z zasady mogą posiadać więcej niż jeden punkt Fermiego, należy się spodziewać bardziej złożonego diagramu fazowego. Dla geometrii drabiny z dwiema nogami dozwolone jest symetryczne i antysymetryczne pasmo energetyczne, wynikające z symetrycznej lub antysymetrycznej kombinacji liniowej funkcji falowej na szczeblach drabiny (w jednocząstkowej bazie). Przy dużych gęstościach,  $n_K \gtrsim 1.6$ , gdzie pasmo antysymetryczne jest całkowicie wypełnione i wektory falowe Fermiego znajdują się tylko na paśmie symetrycznym, układ posiada idealny blokowy porządek magnetyczny  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  dla  $U \sim W$ . Zwiększanie potencjału oddziaływania  $U$  prowadzi do jednolitego obrotu bloków, tj. do tworzenia się egzotycznej fazy blokowo-spiralnej (podobnie jak dla geometrii łańcucha). Dla małych gęstości ładunku, blisko połówkowego wypełnienia  $n_K \sim 1$ , cztery wektory falowe Fermiego w dwóch pasmach energetycznych powodują powstanie separacji fazowej z (dominującymi) blokami  $\pi$ ,  $\pi/2$  oraz  $\pi/3$ . Gdy  $n_K \sim 1.5$ , konkurujące skale energetyczne w OSMP



RYSUNEK 6: Magnetyczny diagram fazowy w funkcji gęstości  $n_K$  oraz oddziaływania  $U$  uogólnionego modelu Kondo-Hiesenberg na drabinie. Pionowe linie w rejonie separacji fazowej oznaczają szczególne wartości gęstości elektronowej  $n_K = 1.17, 1.25$ , dla których idealny magnetyzm blokowy został otrzymany. Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H6].

powodują pojawienie się “strumienia spinowego” (spin flux), tj. fazy, która może być nawiązano postrzegana jako prądy spinowy cyrkulujący na czterech węzłach ( $2 \times 2$ ) wycinka drabiny. Należy jednak pamiętać, że z powodu kwantowej natury tego stanu, nie ma skończonych statycznych prądów w systemie. Podsumowując, analiza przedstawiona w Ref. [H6] wskazuje, że materiały na bazie żelaza w geometrii drabin wykazują wyraźne tendencje do formowania bloków magnetycznych o różnych kształtach i rozmiarach. Ponadto, magnetyczny diagram fazowy zawiera fazy znane z miedzianów (skłonności do AFM) z tymi odkrytymi w manganitach (separacja fazowa) oraz pniktydach żelaza (magnetyzm blokowy).

### Dynamiczne właściwości spinów

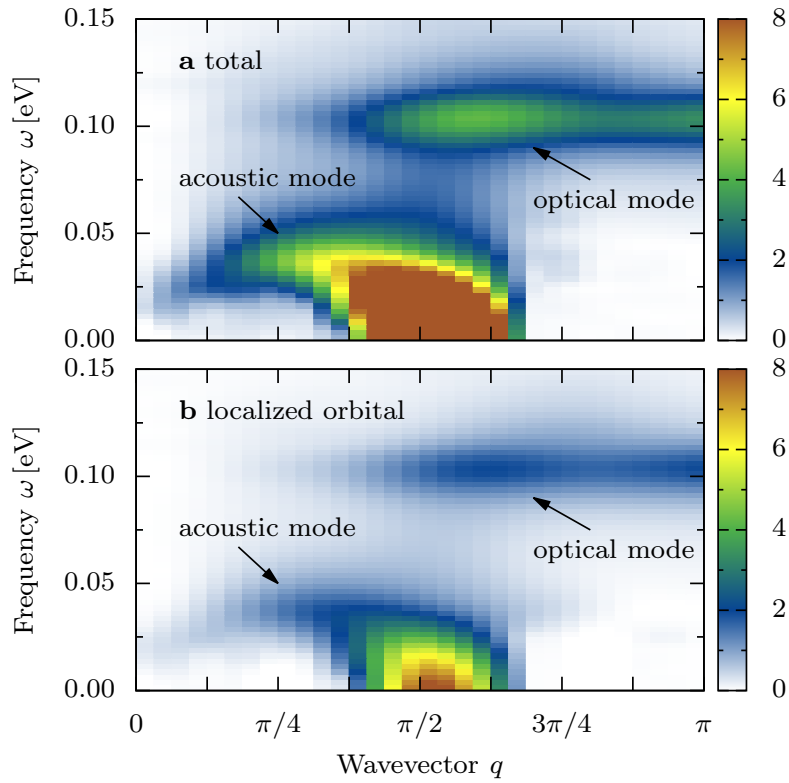
Do tej pory omówione zostały właściwości statyczne (dla zerowej temperatury) dla wielopasmowego modelu Hubbarda i efektywnego modelu OSMP, tj. ich uporządkowanie magnetyczne w stanie podstawowym. Dodatkowych informacji może udzielić analiza stanów wzbudzonych (tj. analiza funkcji widmowych i ich zależności od energii i pędu). Eksperyment INS na drabinie  $\text{BaFe}_2\text{Se}_3$  [41] (przejawiającej magnetyzm blokowy  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ ) ujawnił istnienie dwóch modów - akustycznego i optycznego - rozdzielonych przerwą energetyczną. Podobna charakterystyka spektrum spinowego została pokazana dla  $\text{BaFe}_2\text{S}_3$  [40] oraz  $\text{RbFe}_2\text{Se}_3$  [39], chociaż w tych związkach zidentyfikowano zwykle kanoniczne uporządkowanie  $(\pi, 0)$ . Ponieważ wspomniane pomiary wykonano na polikryształach (na proszku), nie podały one szczegółowych informacji o zależności pędu w strefie Brillouina ze względu na sferyczne uśrednienie wektora falowego.

W Ref. [H1] przedstawiono pierwsze (wg wiedzy autora) badanie numeryczne dynamicznego współczynnika struktury magnetycznej (SSF - spin structure factor)  $S(q, \omega)$  w wielopasmowym modelu Hubbarda. Dynamikę spinu w temperaturze zerowej można wyznaczyć z dynamicznej funkcji Greena:

$$S(q, \omega) = -\frac{1}{L\pi} \sum_{\ell=1}^L e^{-iq(\ell-L/2)} \text{Im} \langle \text{GS} | \tilde{\mathbf{S}}_{\ell} \frac{1}{\omega^+ - H + \epsilon_0} \tilde{\mathbf{S}}_{L/2} | \text{GS} \rangle, \quad (7)$$

gdzie  $\omega^+ = \omega + i\eta$  z  $\eta$  jako poszerzeniem, oraz  $|\text{GS}\rangle$  jako stanem podstawowym o energii  $\epsilon_0$ . W powyższym równaniu  $\tilde{\mathbf{S}}_{\ell} = \sum_{\gamma} \mathbf{S}_{\ell, \gamma}$  reprezentuje całkowity spin na węzle  $\ell$  dla całkowitego  $S(q, \omega)$ , lub  $\tilde{\mathbf{S}}_{\ell} = \mathbf{S}_{\ell, \gamma}$  gdy dynamiczny SSF  $S_{\gamma\gamma}(q, \omega)$  wyznaczony jest dla spinów na konkretnym orbitalu  $\gamma$ .

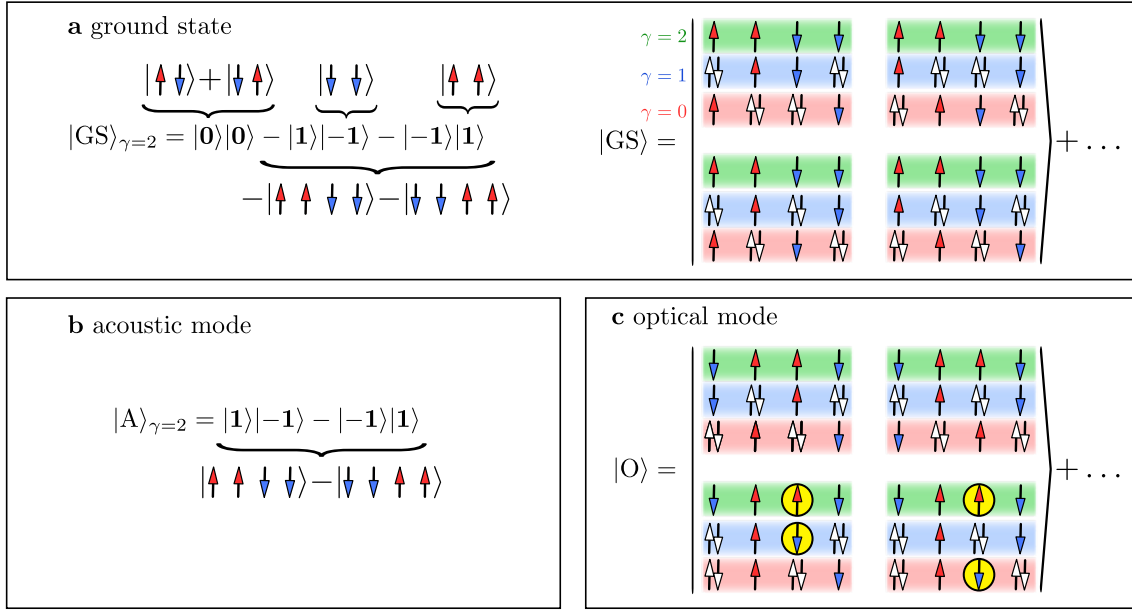
Rys. 7 zawiera jeden z głównych wyników Ref. [H1]: zależność dynamicznego SSF od energii oraz pędu wzbudzeń w fazie blok-OSMP (tj. dla  $U/W = 0.8$ ) w trójorbitalowym  $\Gamma = 3$  modelu Hubbarda (1). Panel (a) przedstawia całkowity dynamiczny SSF,  $S(q, \omega)$ , podczas gdy panel (b) przedstawia tylko wkład ze zlokalizowanego orbitala,  $S_{22}(q, \omega)$ . Przedstawione wyniki pozwalają na wyciągnięcie kilku wniosków: (i) duży wkład do całkowitego  $S(q, \omega)$  mają zlokalizowane elektrony, a wszystkie jakościowe cechy spektrum są widoczne w dynamicznym-SSF orbitala  $\gamma = 2$ ,  $S_{22}(q, \omega)$ . Dokładniejsza analiza wskazuje, że  $S(q, \omega)$  oraz  $S_{22}(q, \omega)$  są tożsame, jeśli zostaną znormalizowane przez całkowity lokalny moment magnetyczny (tj.  $\mathbf{S}^2 = 3/4$  dla zlokalizowanych elektronów  $S = 1/2$  oraz  $\mathbf{S}^2 = 2$  dla całkowitego spinu dla układu trójorbitalowego). (ii) Zakres energetyczny spektrum spinowego jest znacznie mniejszy do całkowitej energii kinetycznej  $W = 2.45$  [eV]. (iii) Na Rys. 7 widać dwa typy wzbudzeń: niskoenergetyczne pasmo dyspersyjne (akustyczne)  $\omega \lesssim \omega_c = 0.08$  [eV] oraz wysokoenergetyczne pasmo bez dyspersji (optyczne)  $\omega \sim 0.11$  [eV]. Ten ostatni mod przypomina wcześniej opisane cechy spektrum  $\text{BaFe}_2\text{Se}_3$  [41] (z FM blokami  $2 \times 2$ ) oraz  $\text{BaFe}_2\text{S}_3$  [40] i  $\text{RbFe}_2\text{Se}_3$  [39] z porządkiem  $(\pi, 0)$ , który można postrzegać jako FM bloki o rozmiarze  $2 \times 1$ . Podobieństwo



RYSUNEK 7: (a) Całkowity dynamiczny współczynnik struktury spinowej  $S(q, \omega)$ , oraz (b) dynamiczny-SSF dla zlokalizowanych elektronów,  $S_{22}(q, \omega)$ . Na obu wykresach widać niskoenergetyczne wzbudzenia akustyczne oraz wysokoenergetyczne zbudzenia optyczne. Warto zauważyć, że waga spektralna zlokalizowanego pasma,  $S_{22}$ , stanowi  $\sim 50\%$  totalnej wagi dynamicznego-SSF. Wyniki otrzymane przy pomocy trójorbitalowego modelu Hubbarda dla  $n = 4/3$ . Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H1].

wyników numerycznych do widm spinowych ujawnionych przez INS sugeruje, że wyniki z Ref. [H1] są ważne dla różnych chalcogenków żelaza. Argumenty przedstawione w Ref. [H1], a także w Ref. [H4] wskazują, że niskoenergetyczne wzbudzenia spinowe są zdominowane przez fale spinowe pomiędzy blokami z wektorem falowym rozciągającym się między zerem a wektorem uporządkowania  $q_{\max}$ . Z drugiej strony, mod optyczny (optical mode) przypisuje się zlokalizowanym wzbudzeniom wewnątrz bloku (lub nawet na jednym węźle) kontrolowanym przez lokalne oddziaływanie Hunda.

Wyniki przedstawione powyżej, z głównym wkładem do dynamicznego-SSF wynikającym ze zlokalizowanego orbitala, motywują, by wyrazić stany własne systemu w uproszczonej bazie orbitala  $\gamma = 2$ ,  $|\cdot\rangle_{\gamma=2}$ . Dodatkowo, ponieważ elektrony w OSMP w stanie podstawowym są zlokalizowane z  $n_{\gamma=2} = 1$  [71], nie powinny występować podwójne obsadzenia oraz dziury na tym orbitalu [zgodnie z przewidywaniami Ref. [H2] oraz efektywnego modelu (4)]. W takim przypadku stan podstawowy fazy blok-OSMP może być wyrażony jako superpozycja stanów  $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle_{\gamma=2}$  i  $|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle_{\gamma=2}$ , które stanowią  $\sim 50\%$  prawdziwego stanu podstawowego. Powyższy opis można jakościowo ulepszyć badając prosty model. Rozważmy dwa spiny  $S = 1/2$  ferromagnetycznej wyspy jako jeden obiekt  $S = 1$ ,  $|\mathbf{1}\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle_{\gamma=2}$ ,  $|\mathbf{-1}\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle_{\gamma=2}$ , oraz  $|\mathbf{0}\rangle = 1/\sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle_{\gamma=2} + |\downarrow\uparrow\rangle_{\gamma=2})$ . W takiej reprezentacji 4 węzły układu  $S = 1/2$  "zmniejszają" się do dwóch spinów  $S = 1$



RYSUNEK 8: Konfiguracja spinów w zlokalizowanym orbitalu ( $\gamma = 2$ ) dla (a) stanu podstawowego  $|\text{GS}\rangle$  (singlet) oraz (b) stanu wzbudzonego  $|\text{A}\rangle$  (triplet) mającego wkład w mod akustyczny. (c) Konfiguracja cząstek na wszystkich orbitalach dla  $|\text{GS}\rangle$  oraz dla tripletu optycznego  $|\text{O}\rangle$ . Okręgi reprezentują pary antyferromagnetycznych spinów które łamią zasadę Hunda. Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H1].

oddziałujących antyferromagnetycznie. Stan podstawowy tego modelu dany jest przez

$$|\text{GS}\rangle_{\gamma=2} = c_a |\mathbf{0}\rangle|\mathbf{0}\rangle - c_b (|\mathbf{1}\rangle|\mathbf{-1}\rangle + |\mathbf{-1}\rangle|\mathbf{1}\rangle), \quad (8)$$

gdzie  $c_a = c_b = 1/\sqrt{3}$  [zob. schemat na Rys. 8(a)]. Należy zwrócić uwagę, że powyższy stan - zgodnie z wynikami numerycznymi - jest singletem. Ostatnie dwa wyrazy stanu (8) odpowiadają idealnemu uporządkowaniu bloków, tj.  $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle_{\gamma=2}$  i  $|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle_{\gamma=2}$ , podczas gdy pierwszy wyraz określa część  $x$ - $y$  porządku blokowego,

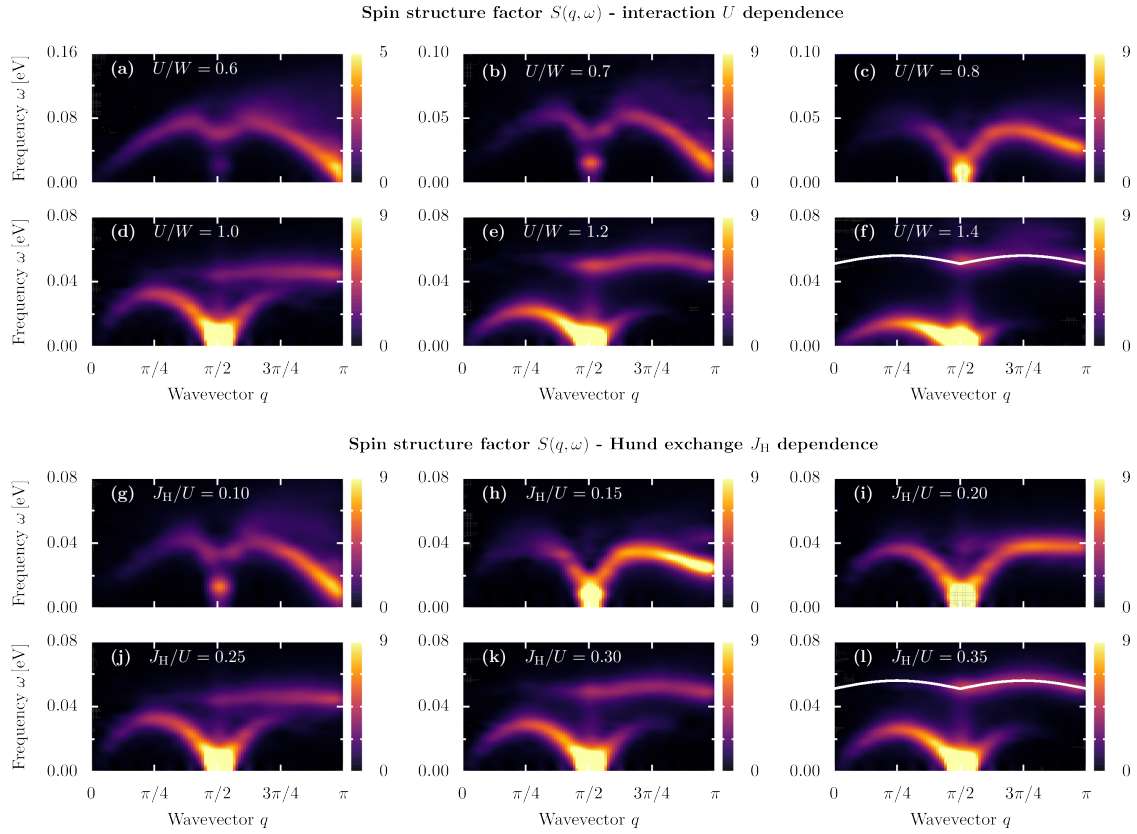
$$|\mathbf{0}\rangle|\mathbf{0}\rangle = \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle_{\gamma=2} + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle_{\gamma=2} + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle_{\gamma=2} + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle_{\gamma=2}). \quad (9)$$

Analiza metodą Lanczosa dla małego układu  $L = 4, \Gamma = 3$  modelu (1) wskazuje, że wektor (8) posiada współczynniki równe  $c_a^2 \simeq 1/6$  oraz  $c_b^2 \simeq 1/4$ , które dają  $\sim 70\%$  przykrycie tego stanu z prawdziwym stanem podstawowym. Warto również zauważyć, że pierwszy stan wzbudzony - mający wkład do modu akustycznego - można zidentyfikować jako triplet postaci

$$|\text{A}\rangle_{\gamma=2} = c_A (|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle_{\gamma=2} - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle_{\gamma=2}), \quad (10)$$

gdzie  $c_A^2 \simeq 4/9$  [zob. Rys. 8(b)]. Duże przykrycie  $|\text{A}\rangle_{\gamma=2}$  z pełnym rozwiązaniem jest również właściwie opisane w uproszczonym modelu, gdyż  $|\mathbf{1}\rangle|\mathbf{-1}\rangle - |\mathbf{-1}\rangle|\mathbf{1}\rangle$  jest jednym z pierwszych wzbudzeń w dwuwęzłowym problemie spinów  $S = 1$ .

Poprawne zrozumienie modu optycznego wymaga analizy wszystkich orbitali. Analiza Lanczosa przedstawiona w Ref. [H1] wskazuje na to, że wysokoenergetyczne wzbudzenia wchodzące w skład modu optycznego na zlokalizowanym orbitalu  $\gamma = 2$  mają



RYSUNEK 9: Zależność od (a-f) oddziaływania Hubbarda  $U$  oraz (g-l) oddziaływania Hunda  $J_H$  dynamicznego współczynnika struktury  $S(q, \omega)$  dla uogólnionego modelu Kondo-Heisenberga dla  $n_K = 0.5$ . Panele (a-f) pokazują wyniki dla  $U/W = 0.6, \dots, 1.4$  oraz  $J_H/U = 0.25$ , natomiast panele (g-l) dla  $J_H/U = 0.1, \dots, 0.35$  i  $U/W = 1$ . Białe linie na panelach (f) i (l) pokazują dyspersję modu optycznego  $\omega_O(q) = 0.051 + 0.005|\sin(2q)|$ . Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H4]

postać

$$|O\rangle_{\gamma=2} \simeq 1/2(|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle_{\gamma=2} + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle_{\gamma=2}). \quad (11)$$

Szczegółowa analiza pozostałych (metalicznych) orbitali  $\gamma = 0, 1$  wskazuje na to, że: (i) stany  $|GS\rangle$  oraz  $|A\rangle$  spełniają regułę Hunda, tj. spiny na różnych orbitalach tego samego węzła są ułożone ferromagnetycznie [zob. Rys. 8(a)]. (ii) Z drugiej strony, stany  $|O\rangle$ , przedstawione na Rys. 8(c), nie spełniają tej reguły: część spinów jest ułożona antyferromagnetycznie. W konsekwencji, główna różnica w energii pomiędzy  $|GS\rangle$  oraz  $|O\rangle$  wynika z lokalnej wymiany Hunda.

Podobnie jak w przypadku właściwości statycznych, efektywny model fazy OSMP, tj. uogólniony model Kondo-Heisenberga (4), pozwala na bardziej dokładny opis dynamicznego współczynnika struktury spinowej  $S(q, \omega)$ . Ref. [H4] zawiera szczegółową analizę dynamiki spinu w OSMP w funkcji oddziaływania  $U$  oraz wymiany Hunda  $J_H$ . Najważniejsze wyniki tej pracy są podsumowane na Rys. 9. Należy zwrócić uwagę, że przy słabym oddziaływaniu,  $U \rightarrow 0$ , model gKH nie opisuje dokładnie fizyki wielopasmowego modelu z powodu założenia, że spiny są zlokalizowane na orbitalu  $\gamma = 1$ . Wyniki w Ref. [H2] wskazują na to, że mapowanie można stosować dla  $U/W \gtrsim 0.5$ .

Dla małych wartości  $U$ , układ znajduje się w stanie paramagnetycznym, a dynamiczny współczynnik struktury spinowej  $S(q, \omega)$  przypomina wynik otrzymane w jednopasmowym modelu Hubbarda dla danego wypełnienia  $n_K$  w limicie  $U \rightarrow 0$ . Zwiększenie oddziaływania  $U$  oraz wejście do fazy blokowo magnetycznej przy  $U \sim W$  sprawia, że spektrum  $S(q, \omega)$  ulega dużej zmianie [zob. Rys. 9(a-d)]. Po pierwsze, waga spektralna niskoenergetycznego modu dyspersyjnego przesuwa się z zakresu wektorów falowych  $\pi/2 < q < \pi$  do regionu  $q \simeq \pi/2$  (dla innych gęstości elektronowych, waga spektralna gromadzi się w okolicy  $q \simeq 2k_F$ ). Ta zmiana odzwierciedla powstanie magnetycznego uporządkowania blokowego  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$  z wektorem propagacji  $q_{\max} = 2k_F$ . W konsekwencji, wzbudzenia o krótkich długościach fal  $q > \pi/2$  oraz niskich energiach są tłumione w blokowej fazie OSMP. Taka interpretacja wskazuje, że dla niskich energii wzbudzenia między blokami są o wiele istotniejsze od wzbudzeń wewnątrz bloków.

Drugą cechą charakterystyczną  $S(q, \omega)$  dla  $U > W$  jest pojawienie się wysokoenergetycznego modu optycznego, tj. wzbudzeń niezależnych od pędu. Zgodnie z wynikami zaprezentowanymi na Rys. 9(c-d), dla  $U \sim U_c \simeq 0.8W$  - równoległe do przesunięcia wcześniej opisanego wagi spektralnej - dyspersja  $\omega(q)$  wzbudzeń spinowych ulega zmianom w zakresie krótkich długości fal. Zwiększenie potencjału oddziaływania do  $U \sim U_c$  powoduje pojawienie się wysokoenergetycznych wzbudzeń dla  $\omega(\pi/2 < q < \pi)$ . Ponadto, analiza statycznego współczynnika struktury  $S(q)$  przedstawiona w Ref. [H2] wskazuje, że układ wchodzi w fazę blok-OSMP przy  $U \simeq U_c$ . Dla  $U > U_c$ , wspomniana waga spektralna "odczepia się" od części dyspersyjnej  $\omega(q)$  i tworzy nowy mod  $\omega_O$  niezależny od  $q$ . Dalsze zwiększenie oddziaływania  $U/W$  prowadzi do wzrostu częstotliwości (energii), przy której dochodzi do zaobserwowania modu optycznego [zob. Rys. 9(d-f)]. Jednocześnie zakres energii wzbudzeń akustycznych  $\omega_A(q)$  zmniejsza się. Takie zachowanie jakościowo przypomina typową zależność całki wymiany spinów w fazie Motta, tj.  $J \propto 1/U$ .

W fazie blok-OSMP, mod dyspersyjny (akustyczny)  $\omega_A(q)$  w małym stopniu zależy od wartości  $J_H$ , w przeciwieństwie do zachowania modu optycznego, co obrazuje Rys. 9(g-l). Jest to zgodne z analizą przedstawioną w Ref. [H1], tj., lokalne wzbudzenia spinowe  $\omega_O$  są w dominującym stopniu kontrolowane przez lokalne oddziaływanie Hunda  $J_H$ . Warto zauważyć, że Ref. [H4] wykazuje, że duża wartość  $J_H$  powoduje pojawienie się wąskiej dyspersji w modzie optycznym. Zostało to przedstawione na Rys. 9(f) (dla  $U = 1.4W$  i  $J_H = 0.25U$ ) oraz Rys. 9(l) (dla  $U = W$  i  $J_H = 0.35U$ ). Chociaż zakres energii dla modów akustycznych ulega zmianom (ze względu na różne  $U$ ), mody optyczne zachowują się w podobny sposób dla obydwu zestawów parametrów. Dyspersja  $\omega_O(q)$  może być wyrażona jako  $\omega_O(q) = \omega_0 + \tilde{J}_O \sin(q/2)$ , gdzie  $\omega_0$  opisuje średnią energię wzbudzeń optycznych, a  $\tilde{J}_O = 0.005$  [eV] ich małą dyspersję. Takie zachowanie wskazuje, że dla dużych wartości  $J_H$  wzbudzenia optyczne mogą poruszać się wewnątrz komórki magnetycznej (wewnątrz wyspy magnetycznej).

### Korelacje i transport ładunku

Kolejnym interesującym aspektem są wzbudzeniach elektronów w fazie OSMP. Ponieważ system w tej fazie jest w ogólności metalem, można spodziewać się skończonej wagi spektralnej przy poziomie Fermiego  $\epsilon_F$  w elektronowej gęstości stanów (DOS - density-of-states). Ref. [H3] oraz Ref. [H5] odnoszą się do tej kwestii, tj. badają wpływ blokowego

oraz blokowo-spiralnego porządku magnetycznego na jednocząsteczkową funkcję spektralną  $A(q, \omega) = A^e(q, \omega) + A^h(q, \omega)$ . Taką funkcję można wyrazić przy pomocy

$$A^e(q, \omega) = -\frac{1}{L\pi} \sum_{\ell} e^{-iq(\ell-L/2)} \text{Im} \langle \text{GS} | c_{\gamma, \ell}^{\dagger} \frac{1}{\omega^+ - H + \epsilon_0} c_{\gamma, L/2} | \text{GS} \rangle, \quad (12)$$

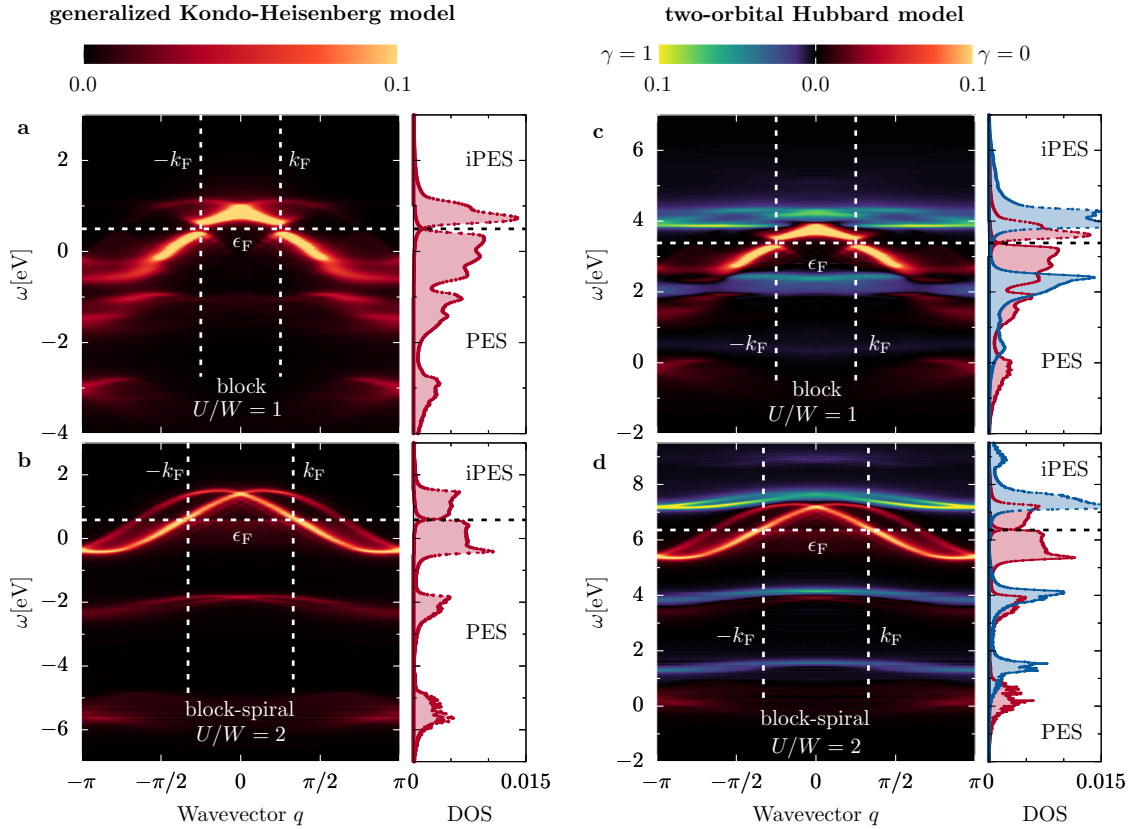
$$A^h(q, \omega) = -\frac{1}{L\pi} \sum_{\ell} e^{-iq(\ell-L/2)} \text{Im} \langle \text{GS} | c_{\gamma, \ell} \frac{1}{\omega^+ + H - \epsilon_0} c_{\gamma, L/2}^{\dagger} | \text{GS} \rangle, \quad (13)$$

gdzie  $c_{\gamma, \ell} = c_{\gamma, \ell, \uparrow} + c_{\gamma, \ell, \downarrow}$ .  $A^e(q, \omega)$  [ $A^h(q, \omega)$ ] reprezentuje retardowaną (fotoemisja elektronów) i adwansowaną (odwrócona fotoemisja dziur) część spektrum. Gęstość stanów można obliczyć jako  $\text{DOS}(\omega) = 1/(\pi L) \sum_q A(q, \omega)$  oraz podobnie dla części elektronowej oraz dziurowej. Należy zwrócić uwagę, że  $A(q, \omega)$  jest bezpośrednio mierzona w eksperymentach kątowno-rozdzielczej spektroskopii fotoemisyjnej.

Jak omówiono powyżej, szczególną cechą OSMF jest współistnienie zlokalizowanych elektronów (opisanych jako spiny w tym orbitalu) oraz mobilnych elektronów [orbital(e) zdelokalizowane]. W fazie bloków magnetycznych przy  $U \simeq W$  dla trójorbitalowego modelu Hubbarda wykazano wcześniej [31], że gęstość stanów (DOS) na poziomie Fermiego  $\epsilon_F$  jest zmniejszona, co wskazuje na zachowanie podobne do pseudoszczeliny (pseudogap-like). Ref. [H3] zawiera analizę  $A(q, \omega)$  oraz  $\text{DOS}(\omega)$  dla dwuorbitalowego modelu Hubbarda (1) oraz modelu gKH (4), zob. Rys. 10. Takie porównanie służy również jako nietrywialny test efektywnego modelu OSMF. Wyniki przedstawione na Rys. 10 w szczególności wskazują na to, że zachowanie modelu gKH z Rys. 10(a,b) idealnie odzwierciedla zachowanie orbitala zdelokalizowanego  $\gamma = 0$  dwuorbitalowego modelu Hubbarda przedstawionego na Rys. 10(c,d). Ponadto, niezależne od wektora falowego pasmo orbitala  $\gamma = 1$  jest zgodne z lokalizacją Motta elektronów. Istnienie szczeliny spektralnej w paśmie  $\gamma = 1$  dodatkowo wspiera argumenty za efektywnym modelem gKH. Należy również zauważyć, że chociaż badany system jest z natury metalem, struktura pasma znacząco różni się od prostej, podobnej do cosinusa, analizy otrzymanej w  $U \rightarrow 0$ . Charakterystyka funkcji  $A(q, \omega)$  w pobliżu wektora Fermiego  $k_F$  oraz duża renormalizacja wag przy wyższych energiach wskazują na skomplikowane współzawodnictwo pomiędzy różnymi stopniami swobody oraz skalami energetycznymi.

Kiedy oddziaływanie  $U$  zwiększa się, a układ wchodzi w fazę blokowo-spiralną, jednocząsteczkowa funkcja spektralna  $A(q, \omega)$  ulega drastycznej zmianie. Na Rys. 10(b) przedstawiono reprezentatywne wyniki dla stanu blokowo-spiralnego o zwinięciu  $\theta/\pi = 0.3$  dla  $U/W = 2$  oraz  $n_K = 1.5$ . Przedstawione wyniki pozwalają na wyciągnięcie dwóch ważnych wniosków: (i) pseudoszczelina przy  $\epsilon_F$  jest zamknięta, ale niektóre dodatkowe szczeliny przy wyższych energiach zostały otwarte. (ii)  $A(q, \omega)$  w pobliżu poziomu Fermiego,  $\omega \sim \epsilon_F$ , wykazuje istnienie dwóch pasm, które przecinają się w punktach  $q = 0$  oraz  $q = \pi$ , z maksimum przy  $q \simeq \theta/2$ . Analiza przedstawiona w Ref. [H3] wykazała, że pasma te przedstawiają dwa rodzaje kwazicząstek: obracające się w lewo (left-movers) oraz w prawo (right-movers) - co odzwierciedla dwa możliwe nawinięcia spiral. Oczywiście jest, że powyższe wyniki wskazują na kwazicząstki które łamią symetrię parzystości, tj. zmiana pędu na przeciwny  $q \rightarrow -q$  zmienia naturę danej kwazicząstki. Co zaskakujące,  $A(q, \omega)$  nie przejawia żadnych szczelin energetycznych, co jest zwyczajowo kojarzone ze skończoną dimeryzacją  $D_{\pi/2}$ , którą obserwujemy w naszym systemie. Należy jednak zwrócić uwagę, że dla kwantowych spinów  $S = 1/2$ , ćwiartkowe wypełnienie  $n_K = 1.5$  sugeruje wypełnienie równe  $2/5$  na dolnym paśmie Kondo (ze względu na różnice energetyczne pomiędzy lokalnymi singletami i tripletami Kondo). Szczelina wynikająca z dimeryzacji spodziewana przy  $q \sim \pi/2$  otworzyłaby się daleko od poziomu Fermiego, a w konsekwencji nie prowadziłyby do istotnego obniżenia energii układu. Tym samym można zauważyć, że kwantowe fluktuacje zlokalizowanych





RYSUNEK 10: Jednocząstkowa funkcja spektralna  $A(q, \omega)$  dla (a) fazy blokowej ( $n_K = 1.5, U/W = 1.0$ ) oraz (b) fazy blokowo-spiralnej ( $n_K = 1.5, U/W = 2.0$ ) policzona dla uogólnionego modelu Kondo-Heisenberga. Panele (c,d) przedstawiają te same wyniki otrzymane przy pomocy dwupasmowego modelu Hubbarda, tj. (c) faza blokowa ( $n = 2.5, U/W = 1.0$ ) oraz (d) faza blokowo-spiralna ( $n = 2.5, U/W = 2.0$ ). Poziome (pionowe) linie pokazują poziom Fermiego  $\epsilon_F$  (wektor falowy  $k_F$ ). (i)PES oznacza (odwrotną-) fotoemisję. Panele po prawej stronie: gęstość stanów  $\text{DOS}(\omega) = (1/L\pi) \sum_q A(q, \omega)$ . Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H3]

i metalicznych spinów są wystarczająco silne do zamknięcia takiej szczeliny. Podobne wnioski można wyciągnąć na podstawie pełnego dwuorbitalowego modelu Hubbarda [zob. Rys. 10(d)].

Kwazicząstki łamiące parzystość omawiane w Ref. [H3] przypominają te znalezione w jednopasmowym modelu Hubbarda z oddziaływaniem spinowo-orbitalowym [75] (SOC - spin-orbit coupling). Taka dyspersja cząstek jest kluczowym składnikiem, razem ze szczeliną nadprzewodzącą, w kilku zaproponowanych układach [76, 77], które mogą posiadać zero-energetyczne mody Majorany (MZM - Majorana zero-energy). Jednakże duża wartość oddziaływania SOC potrzebna do rozdzielenia podwójnie zdegenerowanych pasm elektronów sprawia, że takie systemy są trudne do zrealizowania. W Ref. [H5] pokazano, że konkurujące skale energetyczne w silnie skorelowanych wielopasmowych nadprzewodnikach OSMF prowadzą do topologicznego przejścia fazowego oraz pojawienia się modów MZM. W przeciwieństwie do wcześniej wspomnianych układów, OSMF nie wymaga klasycznych momentów magnetycznych lub klasycznego porządku FM oraz obecności oddziaływania spinowo-orbitalowego Rashby [78]. Wszystkie składniki potrzebne do podtrzymania modów Majorany występują jako konsekwencje

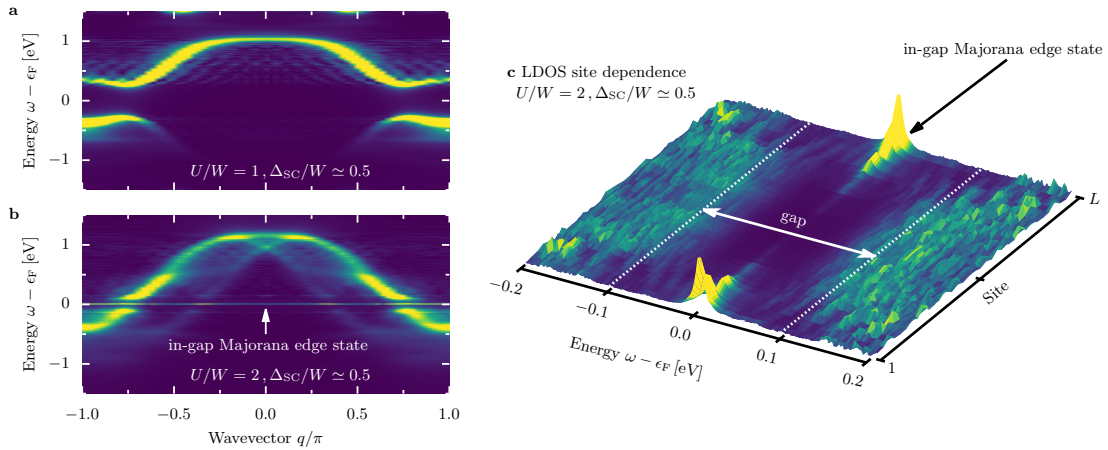
efektów kwantowych indukowanych przez oddziaływanie elektron-elektron (jak opisano wyżej oraz w Ref. [H3]).

Aby wykazać, że układ OSMP może podtrzymać MZM w Ref. [H5], badano

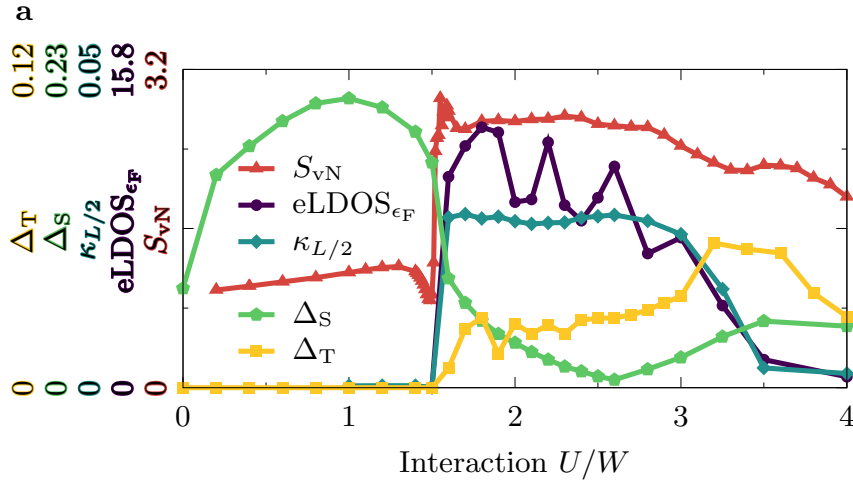
$$H_{\text{SC}} = H_{\text{K}} + \Delta_{\text{SC}} \sum_{\ell} \left( c_{\ell,\uparrow}^{\dagger} c_{\ell,\downarrow}^{\dagger} + \text{H.c.} \right), \quad (14)$$

gdzie  $\Delta_{\text{SC}}$  to lokalna singletowa amplituda parowania nadprzewodzącego. Taką amplitudę można otrzymać poprzez efekt bliskości przy użyciu nadprzewodnika BCS albo może on być właściwością samego nadprzewodzącego materiału na bazie żelaza (pod ciśnieniem lub domieszkowaniem). Istotne jest, że współistnienie nadprzewodnictwa oraz nietrywialnych właściwości magnetycznych jest (w większości) niemożliwa w układach jednoorbitalowy. OSMP zapewnia wyjątkową platformę, w której te ograniczenia są znoszone przez przestrzenne oddzielenie nadprzewodnictwa i magnetyzmu występujących na różnych orbitalach oraz ich silne korelowanie.

Rys. 11 przedstawia wpływ  $\Delta_{\text{SC}}/W \simeq 0.5$  na jednocząstkową funkcję spektralną  $A(q, \omega)$  dla dwóch kluczowych faz w OSMP: uporządkowania blokowego i blokowo-spiralnego (odpowiednio dla  $U/W = 1$  oraz  $U/W = 2$ ). Zgodnie z oczekiwaniami, w obydwu przypadkach dochodzi do otwarcia nadprzewodzącej szczeliny energetycznej na poziomie Fermiego  $\epsilon_{\text{F}}$  ( $\sim 0.5$  [eV] dla  $U/W = 1$  i  $\sim 0.1$  [eV] dla  $U/W = 2$ ). Co ważne, w fazie blokowo-spiralnej pojawia się dodatkowa waga spektralna wewnątrz szczeliny przy  $\epsilon_{\text{F}}$  [zob. Rys. 11(b)]. Taki mod wewnątrz przerwy energetycznej (in-gap mode) jest cechą charakterystyczną stanu topologicznego - system przejawia przerwę energetyczną wewnątrz układu oraz stany brzegowe na jego krawędziach. Aby potwierdzić taki scenariusz, na Rys. 11(c) przedstawiono lokalną gęstość stanów (LDOS - local density-of-states) w pobliżu energii Fermiego  $\epsilon_{\text{F}}$ . Zgodnie z oczekiwaniami dla nietrywialnej fazy topologicznej, stany energetyczne o zerowej energii są ograniczone do krawędzi układu.



RYSUNEK 11: (a) Wpływ amplitudy parowania nadprzewodnictwa  $\Delta_{\text{SC}}/W \simeq 0.5$  na jednocząstkową funkcję spektralną  $A(q, \omega)$  dla (a)  $U/W = 1$  oraz (b)  $U/W = 2$ , otrzymanej przy pomocy uogólnionego modelu Kondo-Heisenberga dla  $n_{\text{K}} = 0.5$ . Zero-energetyczne mody Majorany są pokazane przez strzałki w (b). (c) Lokalna gęstość stanów (LDOS) wewnątrz przerwy energetycznej. Ostre piki w LDOS na krawędziach reprezentują stany brzegowe Majorany, podczas gdy wewnętrzna część systemu posiada nadprzewodzącą przerwę energetyczną. Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H5]



RYSUNEK 12: Zależność (i) entropii von Neumanna  $S_{vN}$ , (ii) lokalnej gęstości stanów na krawędzi systemu na poziomie Fermiego ( $eLDOS_{\epsilon_F}$ ), (iii) wartości funkcji chiralności na odległości  $L/2$  [tj.  $\tilde{\kappa}^1(L/2)$ ], oraz (iv) nielokalnej singletowej  $\Delta_S$  i tripletowej  $\Delta_T$  amplitudy parowania nadprzewodzącego od oddziaływania Hubbarda  $U$ . Wyniki otrzymane przy pomocy uogólnionego modelu Kondo-Heisenberga dla  $n_K = 0.5$  oraz  $\Delta_{SC}/W = 0.5$ . Rysunek zaczerpnięty z Ref. [H5]

Należy zauważyć, że takie zjawisko nie występuje dla słabszych oddziaływań  $U/W = 1$ . Ponadto, nie można przewidzieć takiego zachowania dla granicznych wartości  $U \rightarrow \infty$  lub  $J_H \rightarrow \infty$ , gdzie OSMP posiada standardowe AFM lub FM uporządkowanie i trywialne nadprzewodnictwo. W przypadku omawianym powyżej, gdy  $U \sim J_H \sim W$ , skale energetyczne OSMP oraz nadprzewodnictwo prowadzą do pojawienia się nietrywialnej fazy topologicznej kontrolowanej przez oddziaływanie elektron-elektron  $U$ .

Rys. 12 przedstawia diagram fazowy MZM, z fazą trywialną topologicznie dla  $U < U_c^T \simeq 1.5$  oraz fazą nietrywialną dla  $U > U_c^T$ . LDOS na krawędzi systemu ( $\ell = 1$ ) w pobliżu poziomu Fermiego,  $\omega \sim \epsilon_F$  uzyskuje gwałtownie skończoną wartość dla  $U > U_c^T \simeq 1.5$ . Ten sam rysunek przedstawia również funkcję korelacji chiralności  $\tilde{\kappa}^1(L/2) = \langle \kappa_{L/3}^1 \cdot \kappa_{3L/4}^1 \rangle$ . Jak widać na wykresie,  $\tilde{\kappa}^1(L/2)$  również przyjmuje niezerową wartość dokładnie w  $U_c^T$ , zgodnie z zachowaniem LDOS na krawędzi. Co ciekawe, w układzie bez amplitudy parowania (omówionym powyżej oraz w Ref. [H3]), przy podobnej wartości  $U \simeq 1.6$  faza blokowo-spiralna jest stabilizowana. Ponadto, ponieważ MZM na krawędziach systemu o skończonej długości są ze sobą skorelowane, można zauważyć nagły wzrost splątania, mierzony entropią splątania von Neumanna  $S_{vN}(\ell) = -\text{Tr} \rho_\ell \ln \rho_\ell$  (gdzie  $\rho_\ell$  to zredukowana macierz gęstości podsystemu o rozmiarze  $\ell$ ). Wyniki przedstawione na Rys. 12 dla układu podzielonego na dwie równe części,  $\ell = L/2$ , rzeczywiście wskazują, że tak jest.

Wyniki zaprezentowane w Ref. [H5] wskazują na to, że zwiększenie oddziaływania Hubbarda  $U$  w OSMP ze skończoną amplitudą nadprzewodnictwa prowadzi do wystąpienia topologicznego przejścia fazowego w układzie. To przejście jest kontrolowane przez zmianę właściwości magnetycznych, tj. poprzez pojawienie się skończonej chiralności widocznej w funkcji korelacji  $\langle \kappa_\ell^1 \cdot \kappa_m^1 \rangle$ . Wyniki przedstawione w Ref. [H5] w pełni charakteryzują pojawienie się modów MZM w przejściu topologicznym. Należy zauważyć, że obecności MZM towarzyszy pojawienie się tripletowej składowej nadprzewodnictwa [77]. Takie zachowanie zostało potwierdzone w omawianym systemie. Na Rys. 12

przedstawiono zależność od potencjału oddziaływania  $U$  nielokalnej singletowej  $\Delta_S$  oraz tripletowej  $\Delta_T$  amplitudy parowania nadprzewodzącego, zdefiniowanych jako

$$\Delta_S = \sum_{\ell=L/4}^{3L/4} |\Delta_{S,\ell}|, \quad \Delta_T = \sum_{\ell=L/4}^{3L/4} (|\Delta_{T0,\ell}| + |\Delta_{T\downarrow,\ell}| + |\Delta_{T\uparrow,\ell}|), \quad (15)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \Delta_{S,\ell} &= \langle c_{\ell,\uparrow}^\dagger c_{\ell+1,\downarrow}^\dagger - c_{\ell,\downarrow}^\dagger c_{\ell+1,\uparrow}^\dagger \rangle, & \Delta_{T0,\ell} &= \langle c_{\ell,\uparrow}^\dagger c_{\ell+1,\downarrow}^\dagger + c_{\ell,\downarrow}^\dagger c_{\ell+1,\uparrow}^\dagger \rangle, \\ \Delta_{T\uparrow,\ell} &= \langle c_{\ell,\uparrow}^\dagger c_{\ell+1,\uparrow}^\dagger \rangle, & \Delta_{T\downarrow,\ell} &= \langle c_{\ell,\downarrow}^\dagger c_{\ell+1,\downarrow}^\dagger \rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Biorąc pod uwagę uzyskane wyniki, poniższe uzasadnienie można by wykorzystać do wyjaśnienia efektów topologicznych [79–83] w 2D nadprzewodnikach na bazie żelaza: konkurujące skale energetyczne obecne w wielopasmowych związkach, które są konsekwencją oddziaływania Hubbarda mogą prowadzić do pojawienia się egzotycznych właściwości magnetycznych. Te ostatnie razem ze tendencjami do nadprzewodnictwa prowadzą do topologicznie nietrywialnych faz oraz modów MZM.

### Podsumowanie

Podsumowując, orbitalno-selektywna faza Motta jest unikalną właściwością silnie skorelowanych układów z wielopasmową powierzchnią Fermiego, tj. wywodzi się z współzawodnictwa między spinowymi, elektronowymi oraz orbitalowymi stopniami swobody. Seria publikacji [H1-H6] pokazała nowe typy zjawisk, które znacząco różnią się od tych obserwowanych w miedzianach (opisanych przez jednopasmowy model Hubbarda).

Najważniejszą cechą OSMP jest tendencja do formowania bloków magnetycznych o różnych kształtach i rozmiarach, w zależności od gęstości elektronowej i geometrii sieci. Zaobserwowane struktury spinowe są powiązane z wektorem Fermiego  $2k_F$  pasm zdelokalizowanych, ale bloki spinowe w OSMP są znacznie wyraźniejsze niż w te w zwykłej sinusoidalnej strukturze powstającej ze słabo oddziałującej niestabilności Fermiego. Silnie skorelowany charakter zlokalizowanych spinów zwiększa niestabilność  $2k_F$ , w sposób możliwy tylko w OSMP.

Wzbudzenia w OSMP również pokazują unikalne właściwości. Przedstawiona powyżej analiza widm spinowych wskazuje na istnienie dwóch typów wzbudzeń: (i) pasma akustycznego związanego z dynamiką bloków spinowych oraz (ii) pasma optycznego, które powstaje w wyniku lokalnych fluktuacji spinów między orbitalami (kontrolowanych przez oddziaływanie Hunda). Ponadto OSMP posiada egzotyczne wzbudzenia elektronów wynikające ze współlistnienia pasm ze zlokalizowanymi i zdelokalizowanymi ładunkami. Powyżej pokazano, że oddziaływania między elektronami prowadzą układ w stan z kwazicząstkami łamiącymi parzystość, a nawet w nietrywialny stan topologiczny z modami Majorany.

Opisany powyżej efektywny model OSMP, tj. uogólniony model Kondo-Heisenberga, pozwala na bardziej szczegółowe badanie tej dziedziny fizyki. Ponadto, wyniki przedstawione w pracy dostarczają również motywacji i wskazówek teoretycznych dla hodowców kryształów i eksperymentatorów do odkrywania nowych niskowymiarowych związków na bazie żelaza, które mogą wykazywać opisane tutaj egzotyczne właściwości.

### Bibliografia

- [1] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).

- [2] E. Dagotto and T. M. Rice, *Science* **271**, 618 (1996).
- [3] D. J. Scalapino, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1383 (2012).
- [4] R. Jördens, N. Strohmaier, K. Günter, H. Moritz, and T. Esslinger, *Nature* **455**, 204 (2008).
- [5] U. Schneider, L. Hackermüller, S. Will, Th. Best, I. Bloch, T. A. Costi, R. W. Helmes, D. Rasch, and A. Rosch, *Science* **322**, 1520 (2008).
- [6] J. V. Porto, *Science* **340**, 1297 (2013).
- [7] R. A. Hart, P. M. Duarte, T.-L. Yang, X. Liu, T. Paiva, E. Khatami, R. T. Scalettar, N. Trivedi, D. A. Huse, and R. G. Hulet, *Nature* **519**, 211 (2015).
- [8] P. T. Brown, D. Mitra, E. Guardado-Sanchez, R. Nourafkan, A. Reymbaut, C.-D. Hébert, S. Bergeron, A.-M. S. Tremblay, J. Kokalj, D. A. Huse, P. Schauß, and W. S. Bakr, *Science* **363**, 379 (2019).
- [9] J. Koepsell, J. Vijayan, P. Sompet, F. Grusdt, T. A. Hilker, E. Demler, G. Salomon, I. Bloch, and C. Gross, *Nature* **572**, 358 (2019).
- [10] P. T. Brown, E. Guardado-Sanchez, B. M. Spar, E. W. Huang, T. P. Devereaux, and W. S. Bakr, *Nat. Phys.* **16**, 26 (2019).
- [11] J. Vijayan, P. Sompet, G. Salomon, J. Koepsell, S. Hirthe, A. Bohrdt, F. Grusdt, I. Bloch, and C. Gross, *Science* **367**, 186 (2020).
- [12] P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
- [13] J. M. Tranquada, G. Xu, and I. A. Zaliznyak, *J. Magn. Magn. Mater* **350**, 148 (2014).
- [14] J. M. Tranquada, *Handbook of High-Temperature Superconductivity: Neutron Scattering Studies of Antiferromagnetic Correlations in Cuprates*, Springer New York (2007).
- [15] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1589 (2011).
- [16] A. Georges, L.d. Medici, and J. Mravlje, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **4**, 137 (2013).
- [17] R. M. Fernandes and A. V. Chubukov, *Rep. Prog. Phys.* **80**, 014503 (2017).
- [18] M. Uehara, T. Nagata, J. Akimitsu, H. Takahashi, N. Mori, and K. Kinoshita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 2764 (1996).
- [19] D. N. Basov and A. V. Chubukov, *Nat. Phys.* **7**, 272 (2011).
- [20] M. J. P. Gingras and P. A. McClarty, *Rep. Prog. Phys.* **77**, 056501 (2014).
- [21] M. Daghofer, A. Nicholson, A. Moreo, and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **81**, 014511 (2010).
- [22] L. de' Medici, S. R. Hassan, M. Capone, and X. Dai, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 126401 (2009).
- [23] J. M. Caron, J. R. Neilson, D. C. Miller, K. Arpino, A. Llobet, and T. M. McQueen, *Phys. Rev. B* **85**, 180405(R) (2012).

- [24] M. Yi, D. H. Lu, R. Yu, S. C. Riggs, J.-H. Chu, B. Lv, Z. K. Liu, M. Lu, Y.-T. Cui, M. Hashimoto, S.-K. Mo, Z. Hussain, C. W. Chu, I. R. Fisher, Q. Si, and Z.-X. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 067003 (2013).
- [25] F. Hardy, A. E. Bohmer, D. Aoki, P. Burger, T. Wolf, P. Schweiss, R. Heid, P. Adelman, Y. X. Yao, G. Kotliar, J. Schmalian, C. Meingast, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 027002 (2013).
- [26] M. Yi, Z.-K. Liu, Y. Zhang, R. Yu, J.-X. Zhu, J. J. Lee, R. G. Moore, F. T. Schmitt, W. Li, S. C. Riggs, J.-H. Chu, B. Lv, J. Hu, M. Hashimoto, S.-K. Mo, Z. Hussain, Z.Q. Mao, C. W. Chu, I. R. Fisher, Q. Si, Z.-X. Shen and D. H. Lu, *Nat. Comm.* **6**, 7777 (2014).
- [27] J.-X. Zhu, R. Yu, H. Wang, L. L. Zhao, M. D. Jones, J. Dai, E. Abrahams, E. Morosan, M. Fang, and Q. Si, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 216405 (2010).
- [28] S. Chi, Y. Uwatoko, H. Cao, Y. Hirata, K. Hashizume, T. Aoyama, and K. Ohgushi, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 047003 (2016).
- [29] K. Takubo, Y. Yokoyama, H. Wadati, S. Iwasaki, T. Mizokawa, T. Boyko, R. Sutarto, F. He, K. Hashizume, S. Imaizumi, T. Aoyama, Y. Imai, and K. Ohgushi, *Phys. Rev. B* **96**, 115157 (2017).
- [30] P. Materne, W. Bi, J. Zhao, M. Y. Hu, M. L. Amigó, S. Seiro, S. Aswartham, B. Büchner, and E. E. Alp, *Phys. Rev. B* **99**, 020505(R) (2019).
- [31] N. D. Patel, A. Nocera, G. Alvarez, A. Moreo, S. Johnston, and E. Dagotto, *Commun. Phys.* **2**, 64 (2019).
- [32] L. Craco and S. Leoni, *Phys. Rev. B* **101**, 245133 (2020).
- [33] T. Yamauchi, Y. Hirata, Y. Ueda, and K. Ohgushi, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 246402 (2015).
- [34] H. Takahashi, A. Sugimoto, Y. Nambu, T. Yamauchi, Y. Hirata, T. Kawakami, M. Avdeev, K. Matsubayashi, F. Du, C. Kawashima, H. Soeda, S. Nakano, Y. Uwatoko, Y. Ueda, T. J. Sato, and K. Ohgushi, *Nat. Mat.* **14**, 1008 (2015).
- [35] J. Ying, H. Lei, C. Petrovic, Y. Xiao, and V. V. Struzhkin, *Phys. Rev. B* **95**, 241109(R) (2017).
- [36] Y. Zhang, L-F. Lin, J-J. Zhang, E. Dagotto, and S. Dong, *Phys. Rev. B* **95**, 115154 (2017).
- [37] Y. Zhang, L-F. Lin, J.-J. Zhang, E. Dagotto, and S. Dong, *Phys. Rev. B* **97**, 045119 (2018).
- [38] T. Hawaii, Y. Nambu, K. Ohgushi, F. Du, Y. Hirata, M. Avdeev, Y. Uwatoko, Y. Sekine, H. Fukazawa, J. Ma, S. Chi, Y. Ueda, H. Yoshizawa, and T. J. Sato, *Phys. Rev. B* **91**, 184416 (2015).
- [39] M. Wang, M. Yi, S. Jin, H. Jiang, Y. Song, H. Luo, A. D. Christianson, C. de la Cruz, E. Bourret-Courchesne, D.-X. Yao, D. H. Lee, and R. J. Birgeneau, *Phys. Rev. B* **94**, 041111(R) (2016).
- [40] M. Wang, S. J. Jin, Ming Yi, Yu Song, H. C. Jiang, W. L. Zhang, H. L. Sun, H. Q. Luo, A. D. Christianson, E. Bourret-Courchesne, D. H. Lee, Dao-Xin Yao, and R. J. Birgeneau, *Phys. Rev. B* **95**, 060502(R) (2017).

- [41] M. Mourigal, S. Wu, M. B. Stone, J. R. Neilson, J. M. Caron, T. M. McQueen, and C. L. Broholm, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 047401 (2015).
- [42] J. M. Caron, J. R. Neilson, D. C. Miller, A. Llobet, and T. M. McQueen, *Phys. Rev. B* **84**, 180409(R) (2011).
- [43] Y. Nambu, K. Ohgushi, S. Suzuki, F. Du, M. Avdeev, Y. Uwatoko, K. Munakata, H. Fukazawa, S. Chi, Y. Ueda, and T. J. Sato, *Phys. Rev. B* **85**, 064413 (2012).
- [44] S. Wu, J. Yin, T. Smart, A. Acharya, C. L. Bull, N. P. Funnell, T. R. Forrest, G. Simutis, R. Khasanov, S. K. Lewin, M. Wang, B. A. Frandsen, R. Jeanloz, and R. J. Birgeneau, *Phys. Rev. B* **100**, 214511 (2019).
- [45] M. Wang, C. Fang, D.-X. Yao, G. Tan, L. W. Harriger, Y. Song, T. Netherton, C. Zhang, M. Wang, M. B. Stone, W. Tian, J. Hu, and P. Dai, *Nat. Comm.* **2**, 580 (2011).
- [46] B. Wei, H. Qing-Zhen, C. Gen-Fu, M. A. Green, W. Du-Ming, H. Jun-Bao, and Q. Yi-Ming, *Chin. Phys. Lett.* **28**, 086104 (2011).
- [47] Y.-Z. You, H. Yao, and D.-H. Lee, *Phys. Rev. B* **84**, 020406(R) (2011).
- [48] R. Yu, P. Goswami, and Q. Si, *Phys. Rev. B* **84**, 094451 (2011).
- [49] J. Guo, S. Jin, G. Wang, S. Wang, K. Zhu, T. Zhou, M. He, and X. Chen *Phys. Rev. B* **82**, 180520(R) (2010).
- [50] F. Ye, S. Chi, Wei Bao, X. F. Wang, J. J. Ying, X. H. Chen, H. D. Wang, C. H. Dong, and M. Fang, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 137003 (2011).
- [51] J. K. Glasbrenner, I. I. Mazin, Harald O. Jeschke, P. J. Hirschfeld, R. M. Fernandes, and R. Valentí, *Nat. Phys.* **11**, 953 (2015).
- [52] H. Ruiz, Y. Wang, B. Moritz, A. Baum, R. Hackl, and T. P. Devereaux, *Phys. Rev. B* **99**, 125130 (2019).
- [53] B. Pandey, L.-F. Lin, R. Soni, N. Kaushal, J. Herbrych, G. Alvarez, and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **102**, 035149 (2020).
- [54] L.-F. Lin, Y. Zhang, G. Alvarez, A. Moreo, and E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 077204 (2021).
- [55] Y. Zhang, L-F. Lin, A. Moreo, S. Dong, and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **100**, 184419 (2019).
- [56] Y. Zhang, L-F. Lin, A. Moreo, S. Dong, and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **101**, 144417 (2020).
- [57] Q. Luo, A. Nicholson, J. Riera, D.-X. Yao, A. Moreo, and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **84**, 140506(R) (2011)
- [58] Q. Luo and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **89**, 045115 (2014).
- [59] Q. Luo, A. Nicholson, J. Rincón, S. Liang, J. Riera, G. Alvarez, L. Wang, W. Ku, G. D. Samolyuk, A. Moreo, and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **87**, 024404 (2013).
- [60] W.-G. Yin, C.-H. Lin, and W. Ku, *Phys. Rev. B* **86**, 081106(R) (2012).
- [61] S. Dong, J.-M. Liu, and E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 187204 (2014).

- [62] A. Isidori, M. Berović, L. Fanfarillo, L. de' Medici, M. Fabrizio, and M. Capone, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 186401 (2019).
- [63] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [64] U. Schollwöck, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).
- [65] G. Alvarez, *Comput. Phys. Commun.* **180**, 1572 (2009).
- [66] S. R. White, *Phys. Rev. B* **72**, 180403(R) (2005).
- [67] E. Jeckelmann, *Phys. Rev. B* **66**, 045114 (2002).
- [68] H. Benthien and E. Jeckelmann, *Phys. Rev. B* **75**, 205128 (2007).
- [69] A. Nocera and G. Alvarez, *Phys. Rev. E* **94**, 053308 (2016).
- [70] T. D. Kühner and S. R. White, *Phys. Rev. B* **60**, 335 (1999).
- [71] J. Rincón, A. Moreo, G. Alvarez, and E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 106405 (2014).
- [72] J. R. Schrieffer and P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
- [73] E. Dagotto, *Nanoscale Phase Separation and Colossal Magnetoresistance*, Springer Berlin, Heidelberg (2003).
- [74] J. C. Xavier, R. G. Pereira, E. Miranda, and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 247204 (2003).
- [75] G. W. Winkler, M. Ganahl, D. Schuricht, H. G. Evertz, and S. Andergassen, *New J. Phys.* **19**, 063009 (2017).
- [76] S. R. Elliott, and M. Franz, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 137 (2015).
- [77] R. Pawlak, S. Hoffman, J. Klinovaja, D. Loss, and E. Meyer, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **107**, 1 (2014).
- [78] B. Braunecker, G. I. Japaridze, J. Klinovaja, and D. Loss, *Phys. Rev. B.* **82**, 045127 (2010).
- [79] D. Wang, L. Kong, P. Fan, H. Chen, S. Zhu, W. Liu, L. Cao, Y. Sun, S. Du, J. Schneeloch, R. Zhong, G. Gu, L. Fu, H. Ding, and H.-J. Gao, *Science* **362**, 333 (2018).
- [80] P. Zhang, K. Yaji, T. Hashimoto, Y. Ota, T. Kondo, K. Okazaki, Z. Wang, J. Wen, G. D. Gu, H. Ding, and S. Shin, *Science* **360**, 182 (2018).
- [81] T. Machida, Y. Sun, S. Pyon, S. Takeda, Y. Kohsaka, T. Hanaguri, T. Sasagawa, and T. Tamegai, *Nat. Mater.* **18**, 811 (2019).
- [82] Z. Wang, J. O. Rodriguez, L. Jiao, S. Howard, M. Graham, G. D. Gu, T. Hughes, D. K. Morr, and V. Madhavan, *Science* **367**, 104 (2020).
- [83] C. Chen, K. Jiang, Y. Zhang, C. Liu, Y. Liu, Z. Wang, and Jian Wang, *Nat. Phys.* **16**, 536 (2020).



## Pozostałe osiągnięcia naukowo-badawcze

### 3.1 Publikacje naukowe w czasopismach bazy JCR

Całkowita liczba publikacji indeksowanych w Journal Citation Reports: 37

- Annalen der Physik (2020 IF: 3.276) ×1
- Differential Equations and Dynamical Systems (2020 IF: 1.260) ×1
- Nature Communications (2020 IF: 14.920) ×2
- Physical Review A (2020 IF: 3.140) ×1
- Physical Review B (2020 IF: 4.036) ×25
- Physical Review E (2020 IF: 2.529) ×1
- Physical Review Letters (2020 IF: 9.161) ×4
- Physical Review Research (2020 IF: 0.740) ×1
- Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA (2020 IF: 11.200) ×1

Lista publikacji **nie** wchodzących w skład osiągnięcia opisanego w Rozdziale 2:

- A31** *Magnetization dynamics fingerprints of an excitonic condensate  $t_{2g}^4$  magnet*  
N. Kaushal, J. Herbrych, G. Alvarez, and E. Dagotto,  
Phys. Rev. B **104**, 235135 (2021).
- A30** *Coexistence of diffusive and ballistic transport in integrable quantum lattice models*  
P. Prelovšek, M. Mierzejewski, and J. Herbrych,  
Phys. Rev. B **104**, 115163 (2021).
- A29** *Diffusion in the Anderson model in higher dimensions,*  
P. Prelovšek and J. Herbrych,  
Phys. Rev. B **103**, L241107 (2021).
- A28** *Ballistic transport in integrable lattice models with degenerate spectra,*  
M. Mierzejewski, J. Herbrych, and P. Prelovšek,  
Phys. Rev. B **103**, 235115 (2021).
- A27** *Resistivity and its fluctuations in disordered many-body systems: from chains to planes,*  
M. Mierzejewski, M. Środa, J. Herbrych, and P. Prelovšek,  
Phys. Rev. B **102**, 161111(R) (2020).

- A26** *Prediction of exotic magnetic states in the alkali metal quasi-one-dimensional iron selenide compound  $\text{Na}_2\text{FeSe}_2$ ,*  
B. Pandey, L.-F. Lin, R. Soni, N. Kaushal, J. Herbrych, G. Alvarez, and E. Dagotto,  
Phys. Rev. B **102**, 035149 (2020).
- A25** *Vanishing Wilson ratio as the hallmark of quantum spin-liquid models,*  
P. Prelovšek, K. Morita, T. Tohyama, and J. Herbrych,  
Phys. Rev. Research **2**, 023024 (2020).
- A24** *Inelastic neutron scattering study of the anisotropic  $S = 1$  spin chain  $[\text{Ni}(\text{HF}_2)(3\text{-Clpyridine})_4]\text{BF}_4$ ,*  
D. M. Pajerowski, J. L. Manson, J. Herbrych, J. Bendix, A. P. Podlesnyak, J. M. Cain,  
and M. W. Meisel,  
Phys. Rev. B **101**, 094431 (2020).
- A23** *Charge-density-wave melting in the one-dimensional Holstein model,*  
J. Stolpp, J. Herbrych, F. Dorfner, E. Dagotto, and F. Heidrich-Meisner,  
Phys. Rev. B **101**, 035134 (2020).
- A22** *Magnetization and energy dynamics in spin ladders: Evidence of diffusion in time, frequency, position, and momentum,*  
J. Richter, F. Jin, L. Knipschild, J. Herbrych, H. De Raedt, K. Michielsen, J. Gemmer,  
and R. Steinigeweg,  
Phys. Rev. B **99**, 144422 (2019).
- A21** *Sudden removal of a static force in a disordered system: Induced dynamics, thermalization, and transport,*  
J. Richter, J. Herbrych, and R. Steinigeweg,  
Phys. Rev. B **98**, 134302 (2018).
- A20** *Non-equilibrium mass transport in the Fermi-Hubbard model,*  
S. Scherg, T. Kohlert, J. Herbrych, J. Stolpp, P. Bordia, U. Schneider, F. Heidrich-Meisner, I. Bloch, and M. Aidelsburger,  
Phys. Rev. Lett. **121**, 130402 (2018).
- A19** *Density-matrix renormalization group study of a three-orbital Hubbard model with spin-orbit coupling in one dimension,*  
N. Kaushal, J. Herbrych, A. Nocera, G. Alvarez, A. Moreo, F. A. Reboredo, and E. Dagotto,  
Phys. Rev. B **96**, 155111 (2017).
- A18** *Efficiency of fermionic quantum distillation,*  
J. Herbrych, A. E. Feiguin, E. Dagotto, and F. Heidrich-Meisner,  
Phys. Rev. A **96**, 033617 (2017).
- A17** *Possible bicollinear nematic state with monoclinic lattice distortions in iron telluride compounds,*  
C. B. Bishop, J. Herbrych, E. Dagotto, and A. Moreo,  
Phys. Rev. B **96**, 035144 (2017).
- A16** *Self-consistent approach to many-body localization and subdiffusion,*  
P. Prelovšek and J. Herbrych,  
Phys. Rev. B **96**, 035130 (2017).
- A15** *Dynamics of locally coupled oscillators with next-nearest-neighbor interaction,*  
J. Herbrych, A. G. Chazirakis, N. Christakis, and J. J. P. Veerman,  
Differ. Equ. & Dyn. Syst., **29**, 487 (2021).

- A14** *Density correlations and transport in models of many-body localization*,  
P. Prelovšek, M. Mierzejewski, O. Barišić, and J. Herbrych,  
Ann. Phys. (Berlin) **529**, 1600362 (2017).
- A13** *Interaction-induced weakening of localization in few-particle disordered Heisenberg chains*,  
D. Schmidtke, R. Steinigeweg, J. Herbrych, and J. Gemmer,  
Phys. Rev. B **95**, 134201 (2017).
- A12** *Effective realization of random magnetic fields in compounds with large single-ion anisotropy*,  
J. Herbrych and J. Kokalj,  
Phys. Rev. B **95**, 125129 (2017).
- A11** *Universal dynamics of density correlations at the transition to many-body localized state*,  
M. Mierzejewski, J. Herbrych, and P. Prelovšek,  
Phys. Rev. B **94**, 224207 (2016).
- A10** *Typicality approach to the optical conductivity in thermal and many-body localized phases*,  
R. Steinigeweg, J. Herbrych, F. Pollmann, and W. Brenig,  
Phys. Rev. B **94**, 180401(R) (2016).
- A9** *Light induced magnetization in a spin  $S = 1$  easy-plane antiferromagnetic chain*,  
J. Herbrych and X. Zotos,  
Phys. Rev. B **93**, 134412 (2016).
- A8** *Heat conductivity of the Heisenberg spin-1/2 ladder: From weak to strong breaking of integrability*,  
R. Steinigeweg, J. Herbrych, X. Zotos, and W. Brenig,  
Phys. Rev. Lett. **116**, 017202 (2016).
- A7** *Antiferromagnetic order in weakly coupled random spin chains*,  
J. Kokalj, J. Herbrych, A. Zheludev, and P. Prelovšek,  
Phys. Rev. B **91**, 155147 (2015).
- A6** *Effective  $S = 1/2$  description of the  $S = 1$  chain with strong easy plane anisotropy*,  
C. Psaroudaki, J. Herbrych, J. Karadamoglou, P. Prelovšek, X. Zotos, and N. Papanicolaou,  
Phys. Rev. B **89**, 224418 (2014).

Publikacje przed uzyskaniem stopnia doktora:

- A5** *Local spin relaxation within the random Heisenberg chain*,  
J. Herbrych, J. Kokalj, and P. Prelovšek,  
Phys. Rev. Lett. **111**, 147203 (2013).
- A4** *Eigenstate thermalization in isolated spin-chain systems*,  
R. Steinigeweg, J. Herbrych, and P. Prelovšek,  
Phys. Rev. E **87**, 012118 (2013).
- A3** *Spin hydrodynamics in the  $S = 1/2$  anisotropic Heisenberg chain*,  
J. Herbrych, R. Steinigeweg, and P. Prelovšek,  
Phys. Rev. B **86**, 115106 (2012).
- A2** *Coexistence of anomalous and normal diffusion in integrable Mott insulators*,  
R. Steinigeweg, J. Herbrych, P. Prelovšek, and M. Mierzejewski,  
Phys. Rev. B **85**, 214409 (2012).

- A1** *Finite-temperature Drude weight within the anisotropic Heisenberg chain*,  
J. Herbrych, P. Prelovšek, and X. Zotos,  
Phys. Rev. B **84**, 155125 (2011).

### Krótki opis

#### Transport w niskowymiarowych systemach kwantowych:

Ref. [A1-A9,A18,A20,A22-A24,A28,A30].

Transport w układach silnie skorelowanych elektronów ustanawia kilka nowych - całkowicie kwantowych - aspektów, wykraczających daleko poza "standardowe" słabe rozproszenie lub teorie transportu Boltzmann. Takie zachowanie jest szczególnie widoczne w układach o zmniejszonej wymiarowości (np. w 1D łańcuchach lub kwazi-1D drabiniach). Najważniejszymi modelami do badania takich zjawisk są: antyferromagnetyczny model Heisenberga oddziałujących spinów oraz jednopasmowy model Hubbarda opisujący oddziałujące elektrony. W serii publikacji, przy pomocy teorii liniowej odpowiedzi, badałem wielkości charakteryzujące transport w niskowymiarowych, silnie skorelowanych modelach, m.in. dynamiczne przewodnictwo  $\sigma(\omega)$ , dynamiczny współczynnik struktury  $S(q, \omega)$  oraz stałą dyfuzji. Ponadto, analizowałem też odpowiedź układu w sytuacjach nierównowagowych, np., po zmianie parametrów hamiltonianu.

#### Lokalizacja wielociałowa:

Ref. [A10-A14,A16,A21,A27,A29].

Fenomen lokalizacji wielociałowej (MBL - many-body localization) opisuje rywalizację nieporządku (domieszek) i oddziaływania w układach silnie skorelowanych cząstek. Co więcej, zjawisko MBL stawia fundamentalne pytania dotyczące statystycznych właściwości takich układów. Liczne badania numeryczne sugerują, że w prototypowych modelach 1D istnieje krytyczna wartość nieporządku, w której istnieje przejście z zachowania ergodycznego do lokalizacji. Takie przejście charakteryzuje się kilkoma kryteriami: zmianą w statystyce poziomów energetycznych i właściwościach spektralnych, powolnym wzrostem entropii splątania, zanikiem transportu, nieergodycznym zachowaniem funkcji korelacji oraz brakiem termalizacji. Ta ostatnia cecha jest eksperymentalną sondą w układach zimnych atomów (cold-atom systems). Moje prace na ten temat skupiają się na właściwościach dynamicznych funkcji korelacji w "podstawowym modelu MBL", tj. 1D modelu Heisenberga oddziałujących spinów lub równoważnego modelu oddziałujących fermionów (otrzymanego przy pomocy transformacji Jordana-Wignera).

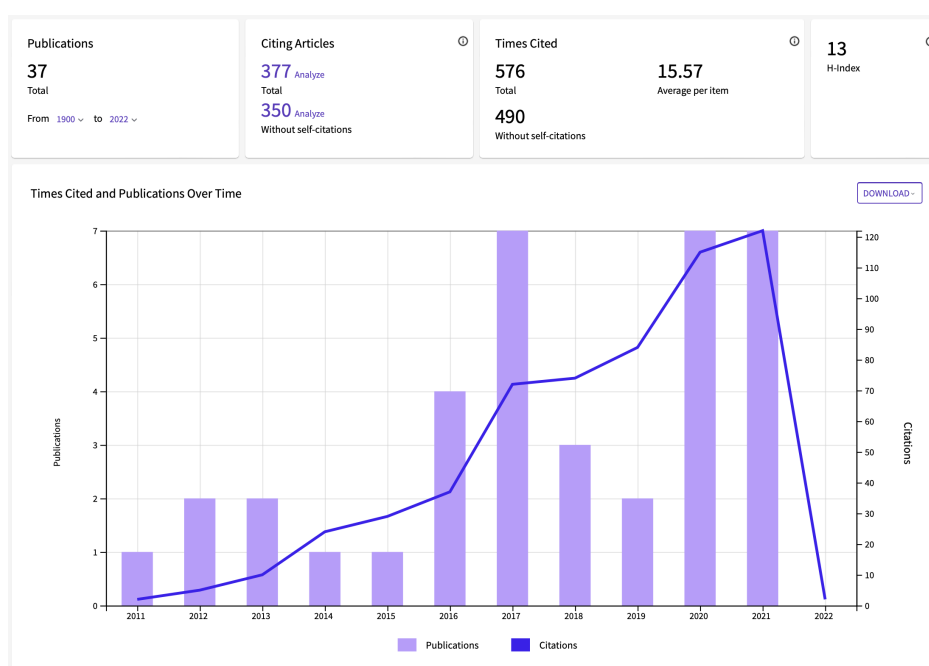
#### Badania modeli wielopasmowych:

Ref. [A17,A19,A26,A31].

Moje zainteresowanie fizyką modeli wielopasmowych wykracza poza to opisane w Rozdziale 2 jako "osiągnięcie naukowe". Badałem m.in. wpływ zniekształcenia sieci jednoskośnej na porządek nematyczny w dwuwymiarowym tellurku żelaza. Ponadto zainteresowałem się wpływem sprzężenia spinowo-orbitalowego w trójpasmowym modelu Hubbarda, ważnym dla rutenianów lub irydatów. Równocześnie poprzez połączenie teorii funkcjonalnej gęstości oraz obliczeń grupy renormalizacji macierzy gęstości, szukałem nowych, niskowymiarowych materiałów, w których można znaleźć orbitalnie selektywną fazę Motta.

## 3.2 Dane bibliometryczne

- Liczba opublikowanych artykułów według bazy Web of Science: 37
- Liczba cytowań według bazy Web of Science: 576 (490 bez autocytoowań)
- Indeks Hirscha według bazy Web of Science: 13
- Średnia liczba cytowań według bazy Web of Science: 15.57
- Sumaryczny impact factor według bazy Web of Science: 241.596



## 3.3 Kierowanie projektami badawczymi

- Principal Investigator w projekcie OPUS 18 zatytułowanym *Magnetic properties of strongly correlated multi-orbital systems* finansowanym przez Narodowego Centrum Nauki (OPUS 18 2019/35/B/ST3/01207).  
Projekt jest realizowany na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej (2020-2022).  
Przyznane środki: 198 600 zł.
- Principal Investigator w projekcie *Polskie Powroty* finansowanym przez Polską Agencję Wymiany Akademickiej (PPN/PPO/2018/1/00035).  
Projekt jest realizowany na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej (2019-2022).  
Przyznane środki: 1 125 000 zł.

## 3.4 Uczestnictwo w programach europejskich

- Wykonawca w projekcie *Crete Center for Quantum Complexity and Nanotechnology* finansowanym w ramach programu EU Seventh Framework Programme (EU FP7)

PEOPLE-ITN-2008 238475 ).

Program był realizowany w latach 2013-2016 na Uniwersytecie Kreteńskim (Heraklion, Greece).

Kierownik projektu: Prof. Dr Xenophon Zotos.

- Wykonawca w projekcie *Low-dimensional quantum magnets for thermal management* finansowanym w ramach programu EU Marie Skłodowska-Curie Action (EU FP7 PEOPLE-ITN-2008 238475).

Program był realizowany w latach 2010-2013 w Instytucie Jožefa Stefana (Ljubljana, Slovenia).

Kierownik projektu: Prof. Dr Peter Prelořsek.

### 3.5 Wystąpienia naukowe

#### Referaty ustne

- Nonequilibrium Quantum Workshop (Krvavec, Słowenia)  
Grudzień 2021
- APS March Meeting 2021 (konferencja zdalna)  
Marzec 2021
- Nonequilibrium Quantum Workshop (Krvavec, Słowenia)  
Grudzień 2019
- Electron Correlation in Superconductors and Nanostructures (Odesa, Ukraina)  
Październik 2019
- International Workshop Korrelationstage (Drezno, Niemcy)  
Wrzesień 2019
- APS March Meeting 2019 (Boston, USA)  
Marzec 2019
- 42nd International Conference of Theoretical Physics (Ustroń, Polska)  
Wrzesień 2018
- APS March Meeting 2018 (Los Angeles, USA)  
Marzec 2018
- Nonequilibrium Quantum Workshop (Krvavec, Słowenia)  
Grudzień 2017
- International Workshop Korrelationstage (Drezno, Niemcy)  
Wrzesień 2017
- 40th International Conference of Theoretical Physics (Ustroń, Polska)  
Wrzesień 2016
- Quantum Magnets 2015 (Kolymbari, Grecja)  
Wrzesień 2015
- Quantum Magnets 2013 (Kolymbari, Grecja)  
Wrzesień 2013
- 36th International Conference of Theoretical Physics (Ustroń, Polska)  
Wrzesień 2012

### Prezentacje w formie plakatu

- Quantum Spin Dynamics (Drezno, Niemcy)  
Wrzesień 2014
- Quantum Magnets 2013 (Kolymbari, Grecja)  
Wrzesień 2013
- 36th International Conference of Theoretical Physics (Ustroń, Polska)  
Wrzesień 2012
- Dynamics and transport in quantum magnets, LOTHERM Summer School (Lublana, Słowenia)  
Czerwiec 2011
- School on “Strongly correlated electronic systems, beyond Fermi liquid theory” (Les Houches, Francja)  
Kwiecień 2011

### Referaty wygłoszone na zaproszenie w instytucjach naukowych

- Polska Akademia Nauk - Instytut Fizyki (Warszawa, Polska)  
Marzec 2021, Listopad 2021
- Instytut Jožefa Stefana (Lublana, Słowenia)  
Marzec 2014, Marzec 2015, Czerwiec 2016, Wrzesień 2021
- Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej (Lublin, Polska)  
Maj 2021
- Uniwersytet Warszawski (Warsaw, Polska)  
Listopad 2020
- Uniwersytet w Osnabrück (Osnabrück, Niemcy)  
Wrzesień 2014, Czerwiec 2015, Czerwiec 2016, Listopad 2020
- Uniwersytet w Göttingen (Göttingen, Niemcy)  
Lipiec 2019
- Uniwersytet w Stuttgarcie (Stuttgart, Niemcy)  
Czerwiec 2019
- Uniwersytet Ludwika i Maksymiliana w Monachium (Monachium, Niemcy)  
Grudzień 2017
- Politechnika Wrocławska (Wrocław, Polska)  
Grudzień 2017
- Joint Institute for Advanced Materials (Knoxville, USA)  
Listopad 2017
- Uniwersytet Techniczny w Brunzswiku (Brunzswik, Niemcy)  
Maj 2014

## 3.6 Członkostwo w towarzystwach naukowych

- American Physical Society

### 3.7 Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych

- Physical Review B (American Physical Society) - 4 recenzje
- Physical Review Letters (American Physical Society) - 2 recenzje
- Physical Review Research (American Physical Society) - 1 recenzja
- New Journal of Physics (IOP Publishing) - 1 recenzja
- Annalen der Physik (Wiley-VCH) - 1 recenzja

### 3.8 Współpraca naukowa

Lista najważniejszych współpracy naukowych:

- Instytut Jožefa Stefana (Ljubljana, Słowenia)  
Prof. Dr Peter Prelovsek, Dr Jure Kokajl, Dr Jernej Mravlje
- Uniwersytet Kreteński (Heraklion, Grecja)  
Prof. Dr Xenophon Zotos
- Uniwersytet Tennessee (Knoxville, USA)  
Prof. Dr Elbio Dagotto, Prof. Dr Adriana Moreo
- Oak Ridge National Laboratory (Oak Ridge, USA)  
Dr Gonzalo Alvarez, Dr Nitin Kaushal, Dr Daniel Pajerowski
- Uniwersytet w Osnabrück (Osnabrück, Niemcy)  
Prof. Dr Robin Steinigeweg
- Uniwersytet w Göttingen (Göttingen, Niemcy)  
Prof. Dr Fabian Heidrich-Meisner, Dr Salvatore R. Manmana
- Kalifornijski Instytut Techniczny (Pasadena, USA)  
Dr Christina Psaroudaki
- Uniwersytet Kolumbii Brytyjskiej (Vancouver, Kanada)  
Dr Alberto Nocera
- Uniwersytet Warszawski (Warszawa, Polska)  
Dr hab. Krzysztof Wohlfeld
- Politechnika Wroclawska (Wrocław, Polska)  
Prof. Dr hab. Marcin Mierzejewski



## Dorobek dydaktyczny oraz działalność administracyjna

### 4.1 Działalność dydaktyczna

- 2020/2021 Modelowanie układów skorelowanych  
Wykład dla III-ego roku studiów magisterskich w języku polskim  
Politechnika Wroclawska
- 2020/2021 Numeryczne metody badania układów kwantowych  
Laboratoria dla I-ego roku studiów magisterskich w języku polskim  
Politechnika Wroclawska
- 2020/2021 Statistical Physics  
Laboratoria dla I-ego roku studiów magisterskich w języku angielskim  
Politechnika Wroclawska
- 2019/2020 Modelowanie układów skorelowanych  
Wykład dla III-ego roku studiów magisterskich w języku polskim  
Politechnika Wroclawska
- 2019/2020 Numeryczne metody badania układów kwantowych  
Laboratoria dla I-ego roku studiów magisterskich w języku polskim  
Politechnika Wroclawska

### 4.2 Opieka naukowa nad studentami i doktorantami

- Kierownik grupy badawczej realizującej badania w ramach projektu *Polskie Powroty* finansowanym przez Polską Agencję Wymiany Akademickiej (jeden wykonawca) oraz projektu *Magnetic properties of strongly correlated multi-orbital systems* finansowanym przez Narodowe Centrum Nauki (dwóch wykonawców).
- Promotor pomocniczy w przewodzie doktorskim. Planowany temat pracy doktorskiej: "Electronic and magnetic properties of low-dimensional strongly correlated multiorbital systems".
- Promotor 2 prac magisterskich.
- Promotor 2 prac inżynierskich.
- Opiekun indywidualnego toku studiów 2 studentów.

### 4.3 Działalność administracyjna

- Członek Rady Wydziału Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wroclawskiej.

- Członek komisji programowej kierunku "Inżynieria Kwantowa" na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej.
- Opiekun koła naukowego "Nabla" na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej (2020-2021).
- Uczestnictwo w komisjach obron prac magisterskich oraz dyplomowych.