

Uniwersalna rola korelacji elektronowych na przykładzie własności wybranych układów nisko-wymiarowych

Andrzej Biborski

Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii
Akademia Górniczo-Hutnicza im. S. Staszica w Krakowie

- prof. Józef Spałek Instytut Fizyki Teoretycznej UJ
- dr Andrzej Kądziaława Instytut Fizyki Teoretycznej UJ
- dr hab. inż. Michał Zegrodnik ACMiN AGH
- dr hab. inż. Michał P. Nowak ACMiN AGH

1. A.P. Kądziaława, A. Bielas, M. Acquarone, **A. Biborski**, M.M. Maśka, J. Spątek, "*H₂ and (H₂)₂ molecules with an ab initio optimization of wave functions in correlated state: Electron-proton couplings and intermolecular microscopic parameters*", New Journal of Physics 16, 123022 (2014)
2. **A. Biborski**, A.P. Kądziaława, J. Spątek, "*Combined shared and distributed memory ab-initio computations of molecular-hydrogen systems in the correlated state: Process pool solution and two-level parallelism*", Computer Physics Communications 197, pp. 7-16. (2015)
3. A.P. Kądziaława, **A. Biborski**, J. Spątek, "*Discontinuous transition of molecular-hydrogen chain to the quasiautomic state: Combined exact diagonalization and ab initio approach*", Physical Review B 92, 161101(R) (2015).
4. **A. Biborski**, A.P. Kądziaława, J. Spątek, "*Metallization of solid molecular hydrogen in two dimensions: Mott-Hubbard-type transition*", Physical Review B 96 (8), 085101 (2017).
5. **A. Biborski**, A. P. Kądziaława, J. Spątek, "*Atomization of correlated molecular-hydrogen chain: A fully microscopic variational Monte Carlo solution*", Physical Review B 98, 085112 (2018).
6. M. Zegrodnik, **A. Biborski**, M. Fidrysiak, J. Spątek, "*Superconductivity in the three-band model of cuprates: Variational wave function study and relation to the single-band case*", Physical Review B 99, 104511 (2019).
7. **A. Biborski**, M. Zegrodnik, J. Spątek, "*Superconducting properties of the hole-doped three-band d-p model studied with minimal-size real-space d-wave pairing operators*", Physical Review B 101, 214504 (2020).
8. **A. Biborski**, A.P. Kądziaława, A. Gorczyca-Goraj, E. Zipper, M.M. Maśka, J. Spątek, "*Dot-ring nanostructure: Rigorous analysis of many-electron effects*", Scientific Reports 6, 29887 (2016).
9. **A. Biborski**, M.P. Nowak, M. Zegrodnik, "*Correlation-induced d-wave pairing in a quantum dot square lattice*", Physical Review B 104, 245430 (2021).

1. A.P. Kądziaława, A. Bielas, M. Acquarone, **A. Biborski**, M.M. Maška, J. Spątek, "*H₂ and (H₂)₂ molecules with an ab initio optimization of wave functions in correlated state: Electron-proton couplings and intermolecular microscopic parameters*", New Journal of Physics 16, 123022 (2014)
2. **A. Biborski**, A.P. Kądziaława, J. Spątek, "*Combined shared and distributed memory ab-initio computations of molecular-hydrogen systems in the correlated state: Process pool solution and two-level parallelism*", Computer Physics Communications 197, pp. 7-16. (2015)
3. A.P. Kądziaława, **A. Biborski**, J. Spątek, "*Discontinuous transition of molecular-hydrogen chain to the quasiautomic state: Combined exact diagonalization and ab initio approach*", Physical Review B 92, 161101(R) (2015).
4. **A. Biborski**, A.P. Kądziaława, J. Spątek, "*Metallization of solid molecular hydrogen in two dimensions: Mott-Hubbard-type transition*", Physical Review B 96 (8), 085101 (2017).
5. **A. Biborski**, A. P. Kądziaława, J. Spątek, "*Atomization of correlated molecular-hydrogen chain: A fully microscopic variational Monte Carlo solution*", Physical Review B 98, 085112 (2018).
6. M. Zegrodnik, **A. Biborski**, M. Fidrysiak, J. Spątek, "*Superconductivity in the three-band model of cuprates: Variational wave function study and relation to the single-band case*", Physical Review B 99, 104511 (2019).
7. **A. Biborski**, M. Zegrodnik, J. Spątek, "*Superconducting properties of the hole-doped three-band d-p model studied with minimal-size real-space d-wave pairing operators*", Physical Review B 101, 214504 (2020).
8. **A. Biborski**, A.P. Kądziaława, A. Gorczyca-Goraj, E. Zipper, M.M. Maška, J. Spątek, "*Dot-ring nanostructure: Rigorous analysis of many-electron effects*", Scientific Reports 6, 29887 (2016).
9. **A. Biborski**, M.P. Nowak, M. Zegrodnik, "*Correlation-induced d-wave pairing in a quantum dot square lattice*", Physical Review B 104, 245430 (2021).

1. Korelacje elektronowe
2. Metoda badawcza
3. Układy wodorowe
4. Płaszczyzny miedziowo-tlenowe
5. Sieci kropek kwantowych - symulatory układów skorelowanych
6. Konkluzje

Korelacje elektronowe

Przykłady układów, w których występują zjawiska indukowane oddziaływaniami między-elektronowymi

- ✓ Atomy i molekuły: widma energetyczne

Przykłady układów, w których występują zjawiska indukowane oddziaływaniami między-elektronowymi

- ✓ Atomy i molekuły: widma energetyczne
- ✓ Tlenki metali przejściowych: stan Motta, AF, SC, SDW, CDW

Przykłady układów, w których występują zjawiska indukowane oddziaływaniami między-elektronowymi

- ✓ Atomy i molekuły: widma energetyczne
- ✓ Tlenki metali przejściowych: stan Motta, AF, SC, SDW, CDW
- ✓ Przewodniki organiczne: SC, AF

Przykłady układów, w których występują zjawiska indukowane oddziaływaniami między-elektronowymi

- ✓ Atomy i molekuły: widma energetyczne
- ✓ Tlenki metali przejściowych: stan Motta, AF, SC, SDW, CDW
- ✓ Przewodniki organiczne: SC, AF
- ✓ Skręcone dwu-warstwy grafenowe: stan Motta, AF, SC

Przykłady układów, w których występują zjawiska indukowane oddziaływaniami między-elektronowymi

- ✓ Atomy i molekuły: widma energetyczne
- ✓ Tlenki metali przejściowych: stan Motta, AF, SC, SDW, CDW
- ✓ Przewodniki organiczne: SC, AF
- ✓ Skręcone dwu-warstwy grafenowe: stan Motta, AF, SC
- ✓ Krysztály molekularne: siły van der Waalsa, metalizacja wodoru(?)

Przykłady układów, w których występują zjawiska indukowane oddziaływaniami między-elektronowymi

- ✓ Atomy i molekuły: widma energetyczne
- ✓ Tlenki metali przejściowych: stan Motta, AF, SC, SDW, CDW
- ✓ Przewodniki organiczne: SC, AF
- ✓ Skręcone dwu-warstwy grafenowe: stan Motta, AF, SC
- ✓ Krysztály molekularne: siły van der Waalsa, metalizacja wodoru(?)
- ✓ Kropki kwantowe, urządzenia w skali nano: widma energetyczne "sztucznych atomów", SB, SC(?), stan Motta(?)

$$\hat{\mathcal{H}}_N = \sum_i^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}_i^2 + \hat{V}(\{\mathbf{r}_i\}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{e-e}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_N = \sum_i^N \left[-\frac{\hbar}{2m} \hat{\nabla}_i^2 + \hat{V}(\{\mathbf{r}_i\}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{e-e}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_N = & \sum_{i,\mu,\sigma} \epsilon_i^\mu \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\mu,\sigma} + \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\sigma} t_{ij}^{\mu\nu} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j, \\ k,l}} \sum_{\substack{\mu,\nu, \\ \gamma,\tau}} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\tau} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l,\tau,\sigma'} \hat{c}_{k,\gamma,\sigma} \end{aligned}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_N = \sum_i^N \left[-\frac{\hbar}{2m} \hat{\nabla}_i^2 + \hat{V}(\{\mathbf{r}_i\}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{e-e}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_N = & \sum_{i,\mu,\sigma} \epsilon_i^\mu \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\mu,\sigma} + \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\sigma} t_{ij}^{\mu\nu} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j, \\ k,l}} \sum_{\substack{\mu,\nu, \\ \gamma,\tau}} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\tau} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l,\tau,\sigma'} \hat{c}_{k,\gamma,\sigma} \end{aligned}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_N |\Psi_N\rangle = E_N |\Psi_N\rangle \xrightarrow{\text{HF}} \hat{\mathcal{F}}_i(\mathbf{r}) |\phi_i(\mathbf{r})\rangle = \epsilon_i |\phi_i(\mathbf{r})\rangle$$

$$\hat{\mathcal{H}}_N = \sum_i^N \left[-\frac{\hbar}{2m} \hat{\nabla}_i^2 + \hat{V}(\{\mathbf{r}_i\}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{e-e}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_N = & \sum_{i,\mu,\sigma} \epsilon_i^\mu \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\mu,\sigma} + \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\sigma} t_{ij}^{\mu\nu} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j, \\ k,l}} \sum_{\substack{\mu,\nu, \\ \gamma,\tau}} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\tau} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l,\tau,\sigma'} \hat{c}_{k,\gamma,\sigma} \end{aligned}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_N |\Psi_N\rangle = E_N |\Psi_N\rangle \xrightarrow{\text{HF}} \hat{\mathcal{F}}_i(\mathbf{r}) |\phi_i(\mathbf{r})\rangle = \epsilon_i |\phi_i(\mathbf{r})\rangle$$

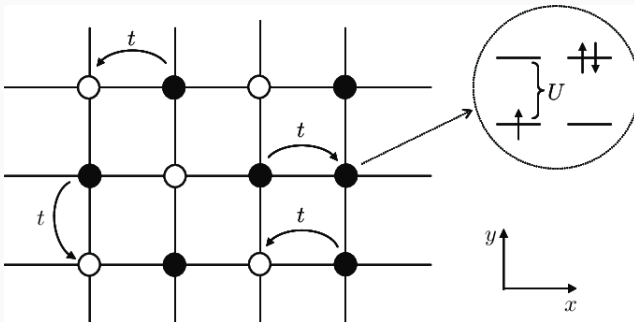
Energia korelaciji / "Stupidity energy"

$$E_c \equiv E_{ex} - E_{HF}$$

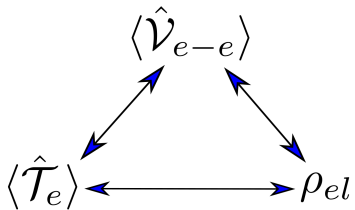
Przybliżenia - modele niskoenergetyczne

Model Hubbarda - najprostszy model opisujący układy silnie skorelowane

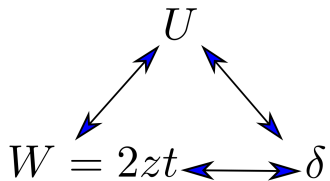
$$\hat{\mathcal{H}} = t \sum_{ij, \sigma} \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$



<https://arxiv.org/abs/0812.1988>



$$\rho_{el}^{1/d} a_0 \approx 0.2$$



$$U/W > 1$$

Metoda badawcza

- ✓ Metody dokładne (Exact Diagonalization, Configuration Interaction)
- ✓ Kwantowe metody Monte-Carlo
- ✓ Metody wariacyjne (w tym wariacyjne Monte-Carlo)
- ✓ DMRG
- ✓ ...

EDABI = *Exact Diagonalization Ab-Initio* (Spałek et al.)

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,\mu,\sigma} \epsilon_i^\mu \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\mu,\sigma} + \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\sigma} t_{ij}^{\mu\nu} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma} \\ + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j, \\ k,l}} \sum_{\substack{\mu,\nu, \\ \gamma,\tau}} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\tau} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l,\tau,\sigma'} \hat{c}_{k,\gamma,\sigma},$$

$$w_{i,\mu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \{\lambda_p\}) = \sum_{j,\nu} \alpha_{j\nu}^{i\mu} \phi_{j\nu}(\mathbf{r}, \{\lambda_{j,\nu}\})$$

$$\langle w_{i,\mu} | w_{j,\nu} \rangle = \delta_{ij} \delta_{\mu\nu}$$

$$t_{ij}^{\mu\nu}(\{\lambda_p\}) = \langle w_{i,\mu} | \hat{\mathcal{T}}(\mathbf{r}) | w_{j,\nu} \rangle$$

$$V_{ijkl}(\{\lambda_p\}) = \langle w_{i,\mu} w_{j,\nu} | \hat{\mathcal{V}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') | w_{k,\gamma} w_{l,\tau} \rangle$$

$$\hat{\mathcal{H}}(\{\lambda_p\}) |\Psi_N\rangle = E_T(\{\lambda_p\}) |\Psi_N\rangle$$



$$\{\partial_{\lambda_p} E_T(\{\lambda_p\}) = 0\}$$

$$\lambda_p \rightarrow \lambda_p + \delta\lambda_p$$



Efektywna implementacja kluczowa:

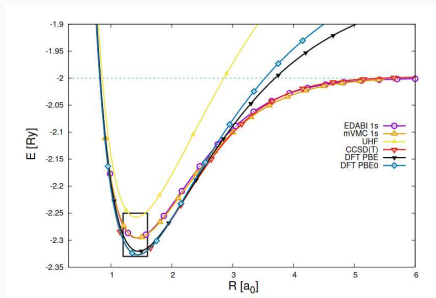
AB, A. P. Kądziaława, J. Spałek

Computer Physics Communications 197, pp. 7-16. (2015).

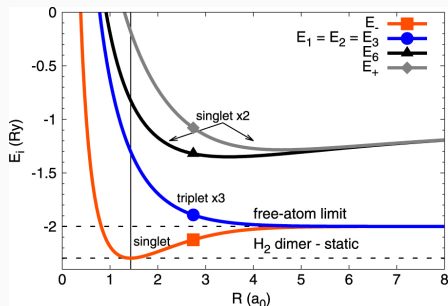
$$N_p/N_s \approx 300$$

Układy wodorowe

Molekuła H_2



M.Suchorowski, Praca
Inżynierska, WFiIS AGH (2020)



A.P. Kądziaława, A. Bielas, M.
Acquarone, A.B., M.M. Maśka, J.
Spałek, New Journal of Physics
(2014)

- Wigner i Huntington: atomizacja (metalizacja) molekularnego wodoru? (1935)

Wigner, Huntington, Ashcroft

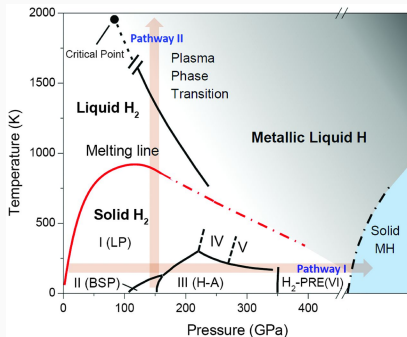
- Wigner i Huntington: atomizacja (metalizacja) molekularnego wodoru? (1935)
- Ashcroft: Lekkie jądro (proton) + sprzężenie elektron-fonon - nadprzewodnictwo w temperaturze pokojowej? (1968)

Wigner, Huntington, Ashcroft

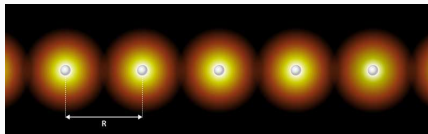
- Wigner i Huntington: atomizacja (metalizacja) molekularnego wodoru? (1935)
- Ashcroft: Lekkie jądro (proton) + sprzężenie elektron-fonon - nadprzewodnictwo w temperaturze pokojowej? (1968)

Wigner, Huntington, Ashcroft

- Wigner i Huntington: atomizacja (metalizacja) molekularnego wodoru? (1935)
- Ashcroft: Lekkie jądro (proton) + sprzężenie elektron-fonon - nadprzewodnictwo w temperaturze pokojowej? (1968)



R. P. Dias and I. F. Silvera, Science 355, 715–718 (2017)



D. Vollhardt, Physics 13, 142 (2020)

Ground-State Properties of the Hydrogen Chain: Dimerization, Insulator-to-Metal Transition, and Magnetic Phases

Mario Motta, Claudio Genovese, Fengjie Ma, Zhi-Hao Cui, Randy Sawaya, Garnet Kin-Lic Chan, Natalia Chepiga, Phillip Helms, Carlos Jiménez-Hoyos, Andrew J. Millis, Ushnish Ray, Enrico Ronca, Hao Shi, Sandro Sorella, Edwin M. Stoudenmire, Steven R. White, and Shiwei Zhang (Simons Collaboration on the Many-Electron Problem)

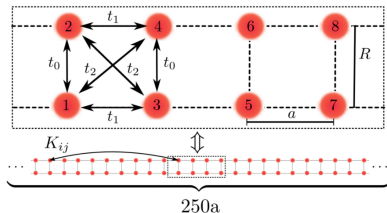
Phys. Rev. X **10**, 031058 – Published 14 September 2020

Towards the Solution of the Many-Electron Problem in Real Materials: Equation of State of the Hydrogen Chain with State-of-the-Art Many-Body Methods

Mario Motta, David M. Ceperley, Garnet Kin-Lic Chan, John A. Gomez, Emanuel Gull, Sheng Guo, Carlos A. Jiménez-Hoyos, Tran Nguyen Lan, Jia Li, Fengjie Ma, Andrew J. Millis, Nikolay V. Prokof'ev, Ushnish Ray, Gustavo E. Scuseria, Sandro Sorella, Edwin M. Stoudenmire, Qiming Sun, Igor S. Tupitsyn, Steven R. White, Dominika Zgid, and Shiwei Zhang (Simons Collaboration on the Many-Electron Problem)

Phys. Rev. X **7**, 031059 – Published 28 September 2017; Erratum [Phys. Rev. X **11**, 029901 \(2021\)](#)

Atomizacja w 1D



$$h(a, R) = \frac{\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle}{N} + f \times a$$

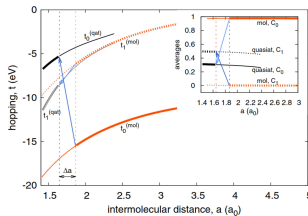
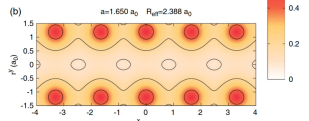
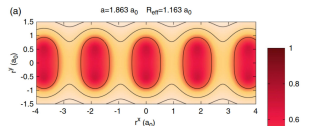
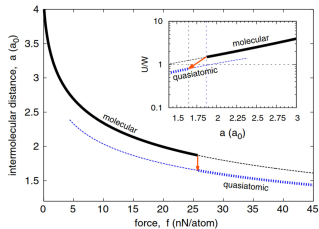
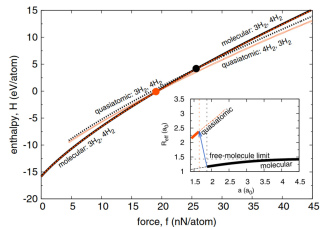
$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i + \sum_{\sigma, i \neq j} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} K_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j + V_{\text{ion-ion}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle w_i | H_1 | w_j \rangle & \equiv \int d^3 r w_i^*(\mathbf{r}) H_1(\mathbf{r}) w_j(\mathbf{r}) \\ & \equiv \epsilon_i \delta_{ij} + t_{ij} (1 - \delta_{ij}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle w_i w_j | V_{12} | w_i w_j \rangle & \equiv \int d^3 r d^3 r' |w_i(\mathbf{r})|^2 V_{12}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |w_j(\mathbf{r}')|^2 \\ & \equiv U \delta_{ij} + K_{ij} (1 - \delta_{ij}), \end{aligned}$$

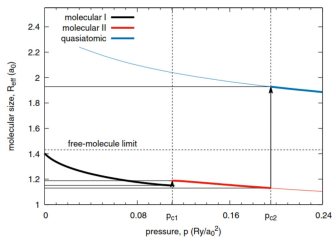
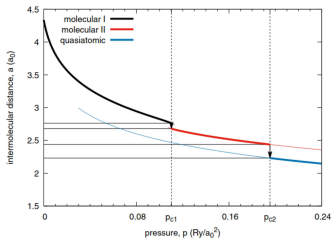
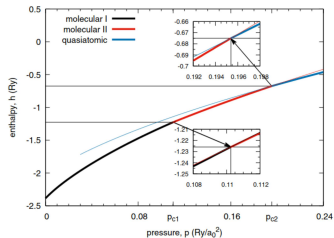
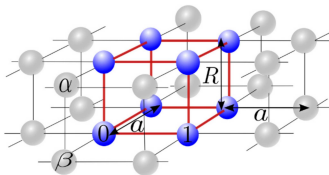
A.P. Kądziaława, AB, J. Spałek, Physical Review B 92, 161101(R) (2015).

Atomizacja w 1D



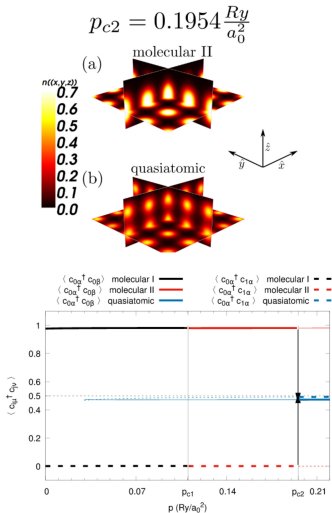
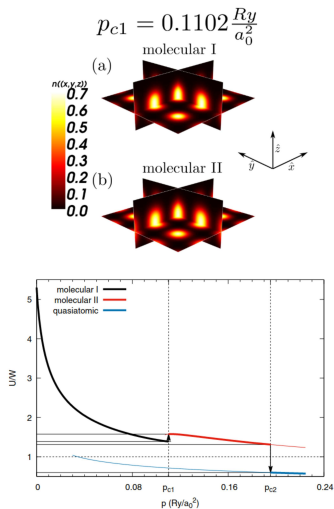
A.P. Kądziaława, AB, J. Spałek, Physical Review B 92, 161101(R) (2015).

Atomizacja w 2D



AB, A.P. Kądziaława, J. Spątek, Physical Review B 96 (8), 085101 (2017).

Atomizacja w 2D



AB, A.P. Kądziaława, J. Spątek, Physical Review B 96 (8), 085101 (2017).

VMC $\rightarrow$ układy o większej liczbie cząstek/orbitali

$$E_G \leq E_T \equiv \frac{\langle \Psi_T | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle} \quad |\Psi_T\rangle = \hat{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{L}} |\Psi_0\rangle$$

$$|\Psi_0\rangle = \left[\sum_{i,j} \sum_{\mu\nu} \sum_{\sigma,\sigma'} F_{i\mu,j\nu}^{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma'}^\dagger \right]^{N_e/2} |0\rangle$$

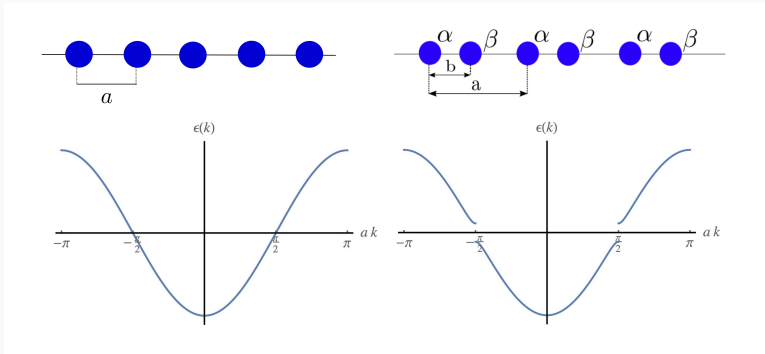
$$|x\rangle \equiv |x_\uparrow\rangle \otimes |x_\downarrow\rangle = \prod_{i,\mu \in x_\uparrow} \hat{c}_{i,\mu,\uparrow}^\dagger \prod_{j,\nu \in x_\downarrow} \hat{c}_{j,\nu,\downarrow}^\dagger |0\rangle$$

$$\rho(x) = \frac{|\langle \Psi_T | x \rangle|^2}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle}$$

$$E_T \approx \frac{1}{M} \sum_m \rho(x_m) \frac{\langle \Psi_T | \mathcal{H} | x_m \rangle}{\langle \Psi_T | x_m \rangle} = \frac{1}{M} \sum_m \rho(x_m) E_T^{\text{loc}}(x_m)$$

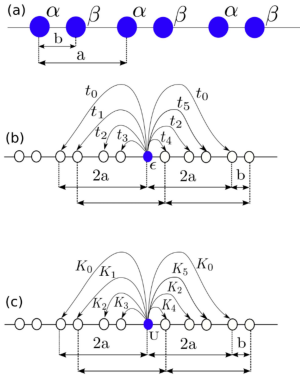
Stabilność dystorsji Peierlsa

"One-dimensional equally spaced chain with one electron per ion is unstable", Peierls (1955), Frölich (1954)



Rozumowanie przy założeniu braku oddziaływań elektron-elektron!

Stabilność dystorsji Peierlsa: $(H_2)_n \rightarrow (H)_{2n}$



$$\frac{H}{N} = h \equiv f \frac{a}{2} + \frac{E}{N}$$

$$h(f; a, b, \zeta) = f \frac{a}{2} + \frac{E(a, b, \zeta)}{N}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i\mu} \epsilon_i^\mu \hat{n}_i + \sum_{ij\mu\nu\sigma} t_{ij}^{\mu\nu} \hat{c}_{i\mu\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\nu\sigma} + U \sum_{i,\mu} \hat{n}_{i\mu\uparrow} \hat{n}_{i\mu\downarrow} \\ + \frac{1}{2} \sum_{ij\mu\nu} K_{ij}^{\mu\nu} \hat{n}_{i\mu} \hat{n}_{j\nu} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|},$$

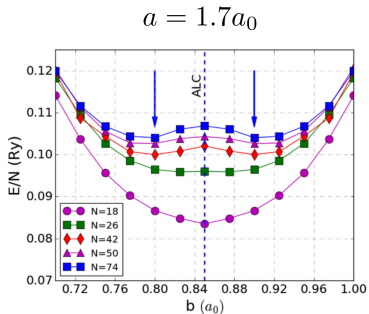
$$\psi_i^\mu(\mathbf{r}) \equiv \sqrt{\frac{\xi^3}{\pi}} e^{-\xi|\mathbf{r}-\mathbf{R}_i^\mu|} \quad w_{i,\mu}(\mathbf{r}) \approx \sum_{j(i,v)}^{L(i,\mu)} \sum_{v \in \{\alpha, \beta\}} c_{jv} \psi_j^v(\mathbf{r}).$$

$$t_{ij}^{\mu\nu} \equiv \langle w_{i,\mu}(\mathbf{r}) | -\nabla^2 - \sum_{l=1}^{N_s} \frac{2}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{r}|} | w_{j,\nu}(\mathbf{r}) \rangle$$

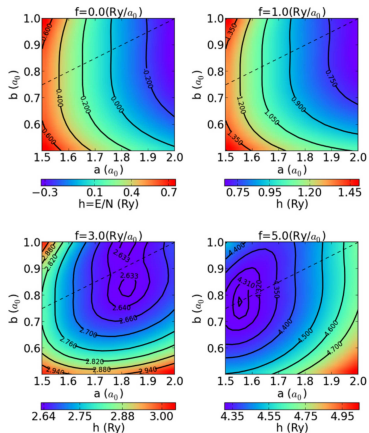
$$V_{ijkl}^{\mu\nu\tau\rho} \equiv \langle w_{i\mu}(\mathbf{r}) w_{j\nu}(\mathbf{r}') | \frac{2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} | w_{k\tau}(\mathbf{r}) w_{l\rho}(\mathbf{r}') \rangle$$

AB, A. P. Kądziaława, J. Spałek, Physical Review B 98, 085112 (2018)

Stabilność dystorsji Peierlsa: $(H_2)_n \rightarrow (H)_{2n}$

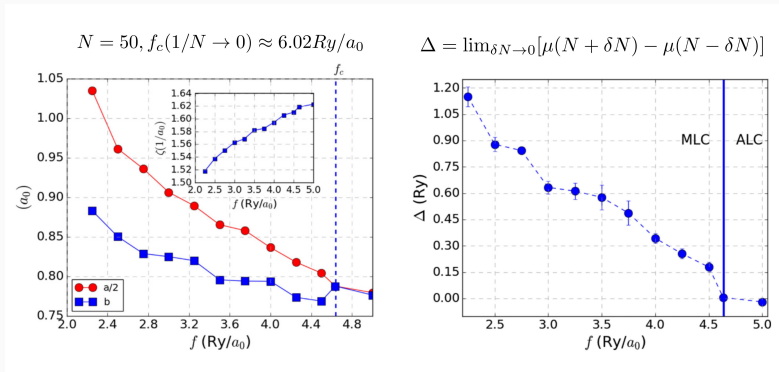


Efekt rozmiarowy wyraźny



AB, A. P. Kądziaława, J. Spałek, Physical Review B 98, 085112 (2018)

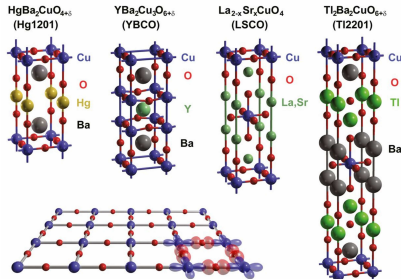
Stabilność dystorsji Peierlsa: $(H_2)_n \rightarrow (H)_{2n}$



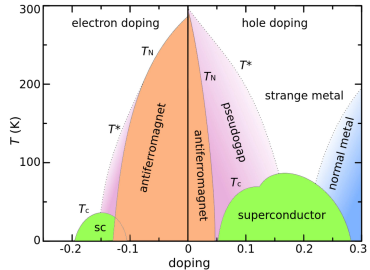
AB, A. P. Kądziaława, J. Spałek, Physical Review B 98, 085112 (2018)

Płaszczyzny miedziowo-tlenowe

Bednorz & Müller (1986)



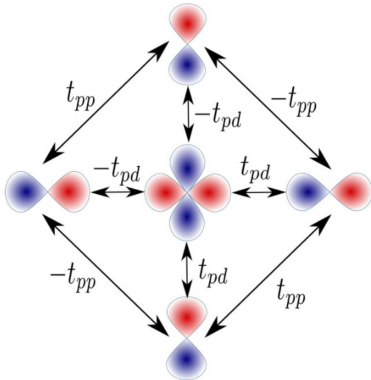
N. Barišić et al.,
 Proceedings of the National Academy of Sciences
 vol. 110, 30 (2013)



wikipedia.org

Model trójpasmowy

Hamiltonian trójpasmowy - model płaszczyzn miedziowo tlenowych



$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\langle il, jl' \rangle} t_{ij}^{ll'} \hat{c}_{il\sigma}^\dagger \hat{c}_{jl'\sigma} + \sum_{il} \epsilon_l \hat{n}_{il} + \sum_{il} U_l \hat{n}_{il\uparrow} \hat{n}_{il\downarrow}$$

$$|\Psi_T\rangle \equiv \hat{P}_G \hat{P}_J \hat{\mathcal{L}}_{S_{\text{tot}}} \hat{\mathcal{L}}_{N_e} |\Psi_0\rangle,$$

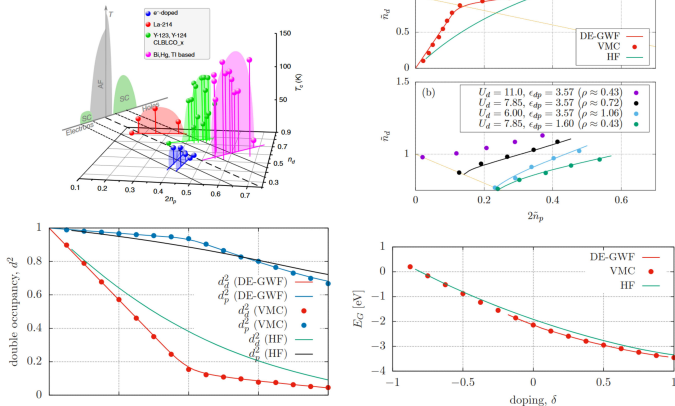
$$\hat{P}_G \equiv \exp \left[- \sum_l g_l \sum_i \hat{n}_{il\uparrow} \hat{n}_{il\downarrow} \right]$$

$$\hat{P}_J \equiv \exp \left[- \sum_{il, jl'} \lambda_{il, jl'} \hat{n}_{il} \hat{n}_{jl'} \right]$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} = & \sum_{\langle il, jl' \rangle} \tilde{t}_{ij}^{ll'} \hat{c}_{il\sigma}^\dagger \hat{c}_{jl'\sigma} + \sum_{il} (\tilde{\epsilon}_l - \tilde{\mu}) \hat{n}_{il} \\ & + \sum_{il, jl'} \tilde{\Delta}_{ij}^{ll'} \hat{c}_{il\uparrow}^\dagger \hat{c}_{jl'\downarrow}^\dagger + \text{H.c.} \end{aligned}$$

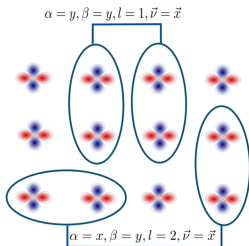
Stan nadprzewodzący

D. Rybicki et al., Nat. Commun. 7,11413 (2016)



M. Zegrodnik, AB, M. Fidrysiak, J. Spałek, Phys. Rev. B 99, 104511 (2019)

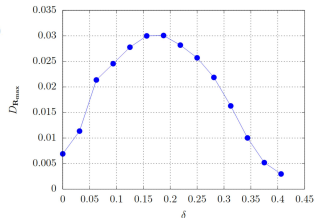
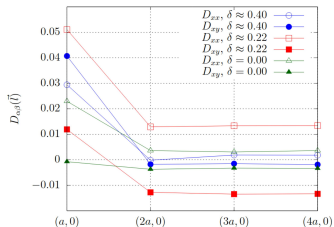
Stan nadprzewodzący



$$\hat{\Delta}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{c}_{i(\mathbf{r})d\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{j(\mathbf{r}+\mathbf{a}_a)d\downarrow}^{\dagger} - \hat{c}_{i(\mathbf{r})d\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{j(\mathbf{r}+\mathbf{a}_a)d\uparrow}^{\dagger})$$

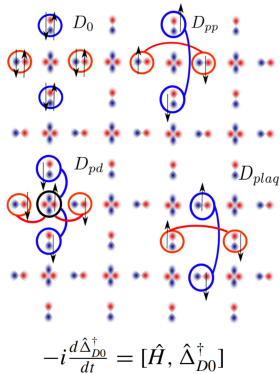
$$D_{\alpha\beta}^{dd}(\mathbf{R}) \equiv \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{\Delta}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \hat{\Delta}_{\beta}(\mathbf{r}) \rangle$$

$$D_{\mathbf{R}_{\max}} \equiv \sum_{\alpha\beta} (-1)^{1-\delta_{\alpha\beta}} D_{\alpha\beta}^{dd}(\mathbf{R} = \mathbf{R}_{\max})$$

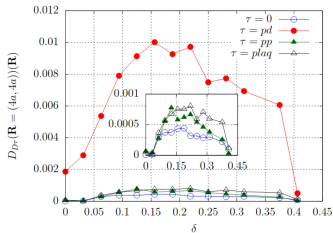
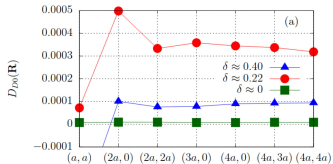


AB, M. Zegrodnik, J. Spałek, Phys. Rev. B 101, 214504 (2020)

Stan nadprzewodzący

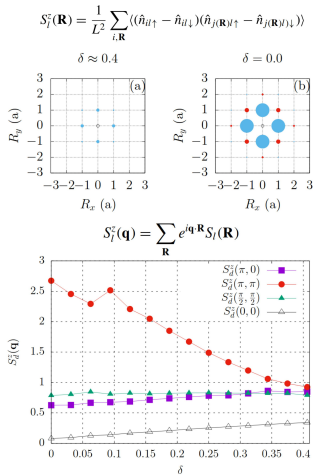


A. Moreo ,E. Dagotto
 Phys. Rev. B 100, 214502 (2019)

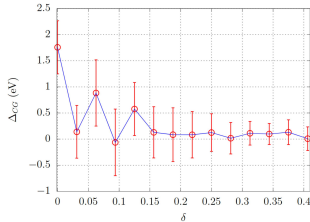


AB, M. Zegrodnik, J. Spatek, Phys. Rev. B 101, 214504 (2020)

Własności magnetyczne i przerwa ładunkowa



$$\Delta_{CG} = \lim_{\delta N \rightarrow 0} [E(N + \delta N) - E(N - \delta N)]$$

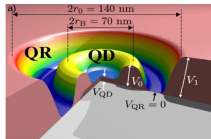


Compounds	La_2CuO_4	$(\text{La}, \text{Gd})_2\text{CuO}_4$
Cu-O network (oxygen coordination)	Octahedron (6)	Pyramid (5)
$d_{\text{Cu-O}}$	1.905 Å	1.936 Å
Δ_{CT}	2.0 eV	1.8 eV
f_{CT}	0.24	0.33
ω_s	3200 cm^{-1}	2800 cm^{-1}

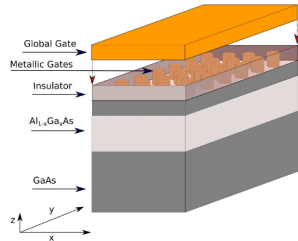
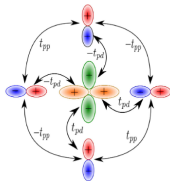
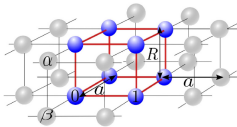
Y. Tokura et al, Phys. Rev. B 41, 11657 (1990)

AB, M. Zegrodnik, J. Spalek, Phys. Rev. B 101, 214504 (2020)

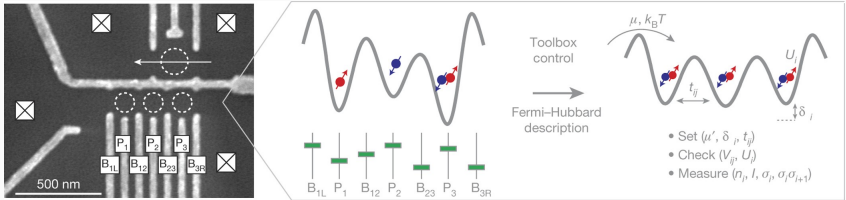
Sieci kropek kwantowych



AB et al. Scientific Reports 6, 29887 (2016)



AB, M.P. Nowak, M. Zegrodnik,
Physical Review B 104, 245430 (2021)

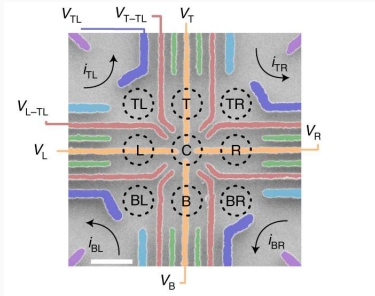


T. Hensgens et al., Nature vol. 548, pages 70–73 (2017)

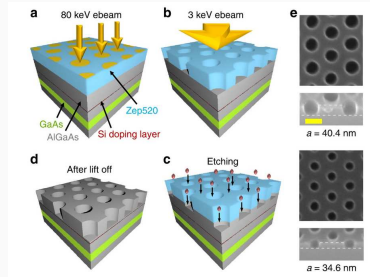
Symulator kwantowy **Modelu Hubbarda**

$$\hat{\mathcal{H}} = t \sum_{ij, \sigma} \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$

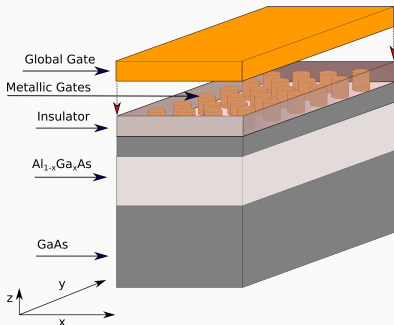
Motywacja



P.A. Mortemousque et al., Nature Nanotechnology vol. **16**, pages 296–301 (2021)

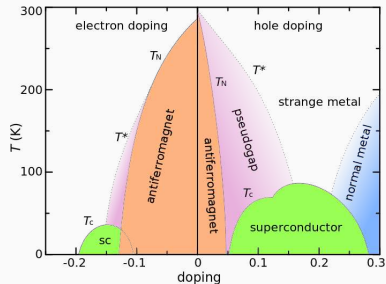


L. Du et al., Nature Communications **9**, 3299 (2018)



Schemat urządzenia zaproponowany
w T.Byrnes et al., Phys. Rev. B **78**,
075320 (2008)

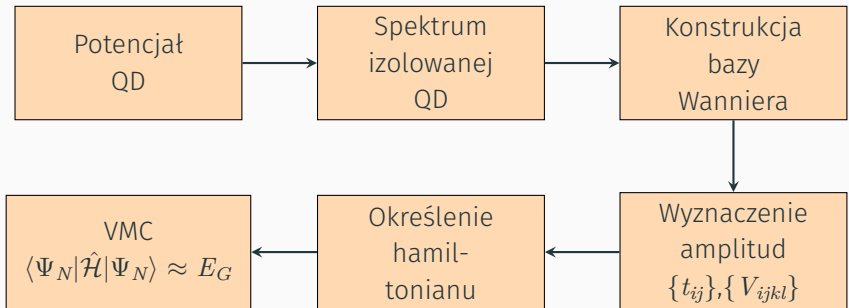
Czy można emulować kupraty?



<https://wikipedia.org>

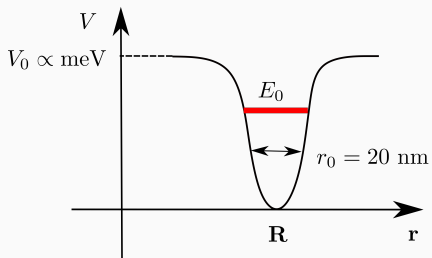
Punktem startowym jest hamiltonian zadany w przestrzeni rzeczywistej

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,\mu,\sigma} \epsilon_i^\mu \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\mu,\sigma} + \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\sigma} t_{ij}^{\mu\nu} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma} \\ + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j, \\ k,l}} \sum_{\substack{\mu,\nu, \\ \gamma,\tau}} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\tau} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l,\tau,\sigma'} \hat{c}_{k,\gamma,\sigma}$$



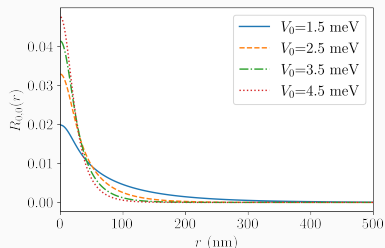
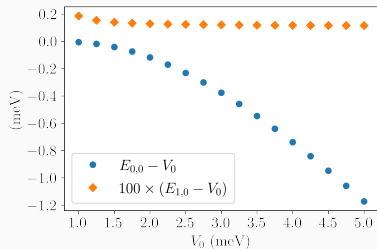
Izolowana kropka kwantowa i jej widmo

Find spectrum $\{\Theta_{n,l}\}$ for single QD



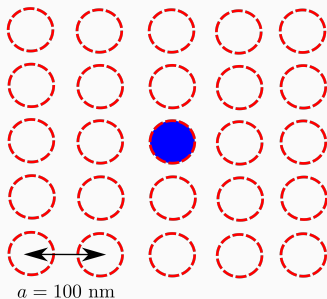
$$V_{\mathbf{R}}^{QD}(\mathbf{r}) = V_0 - V_0 \times \exp \left[- \left(\frac{||\mathbf{r} - \mathbf{R}||}{r_0} \right)^2 \right]$$

$$\Theta_{nl}(r, \phi) = R_{nl}(r) \Phi_l(\phi)$$



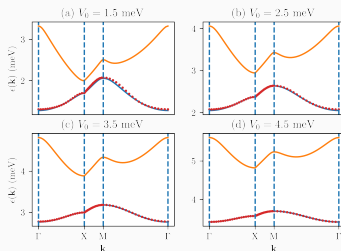
Baza Wanniera, obraz nieoddziałujący

Construct Wannier basis $\{w_{nl}^{R_{ij}}(\mathbf{r})\}$



$$w_{nl}^{R_{ij}}(\mathbf{r}) \equiv \sum_{n',l'} \sum_{\mathbf{r}_Z} \alpha_{r_Z,n',l'} \Theta_{n'l'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{ij} + \mathbf{r}_Z)$$

$$t_{ij}^{\mu\nu} = \left\langle w_{\mu}^i(\mathbf{r}) \left| -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_r^2 + V_a^C(\mathbf{r}) \right| w_{\nu}^j(\mathbf{r}) \right\rangle$$



$$V_0 \nearrow \implies W \equiv |\epsilon_0^{max}(\mathbf{k}) - \epsilon_0^{min}(\mathbf{k})| \searrow$$

$$\frac{W}{k_B} \approx 1(K)$$

$$V_0 \nearrow \implies \epsilon_1^{min}(\mathbf{k}) - \epsilon_0^{max}(\mathbf{k}) \nearrow$$

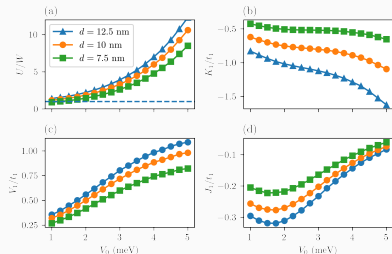
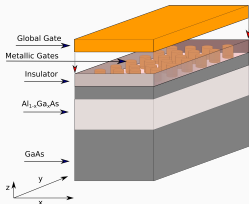
Hamiltonian dla układu oddziałującego

Construct interacting Hamiltonian

$$V_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\tau} = \left\langle \tilde{w}_{\mu}^i(\mathbf{r}, z) \tilde{w}_{\nu}^j(\mathbf{r}', z') \left| \hat{V}_{e-e} \right| \tilde{w}_{\gamma}^k(\mathbf{r}, z) \tilde{w}_{\tau}^l(\mathbf{r}', z') \right\rangle$$

$$\hat{V}_{e-e}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', z, z') = \frac{e^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{r}', z, z')}{4\pi\epsilon_0 \epsilon \sqrt{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2 + (z-z')^2}}$$

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{r}', z, z') = 1 - \frac{(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| + z - z')}{\sqrt{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2 + (z+z'+2d)^2}}$$



$$2.5 \text{ (meV)} \lesssim V_0 \lesssim 4.5 \text{ (meV)}$$

$$d = 7.5 \text{ (nm)}$$

$$\frac{4t_1^2}{U} > J_1$$

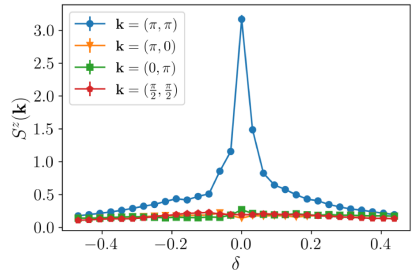
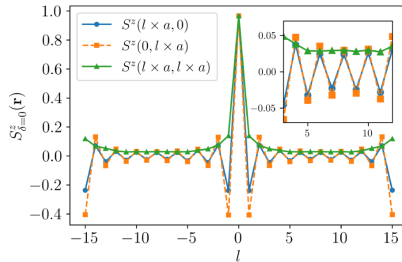
Uporządkowanie AF?

$$\hat{\mathcal{H}}_{QDL} = \hat{\mathcal{T}} + \hat{\mathcal{U}} + \hat{\mathcal{K}} + \hat{\mathcal{V}} + \hat{\mathcal{J}}, Z = 5$$

Uporządkowanie magnetyczne

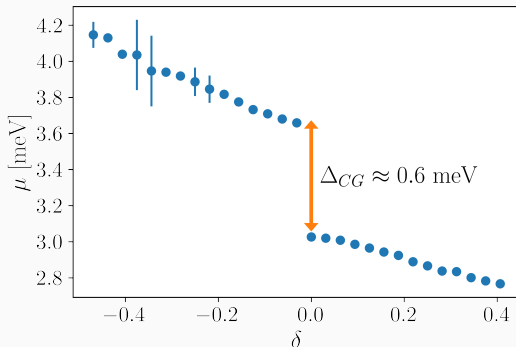
$$S^z(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_x \times N_y} \sum_i ((\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})(\hat{n}_{f(\mathbf{R}_i+\mathbf{r})\uparrow} - \hat{n}_{f(\mathbf{R}_i+\mathbf{r})\downarrow}))$$

$$S^z(\mathbf{k}) = \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} S^z(\mathbf{R}_j)$$



AB, M.P. Nowak, M. Zegrodnik, Physical Review B 104, 245430 (2021)

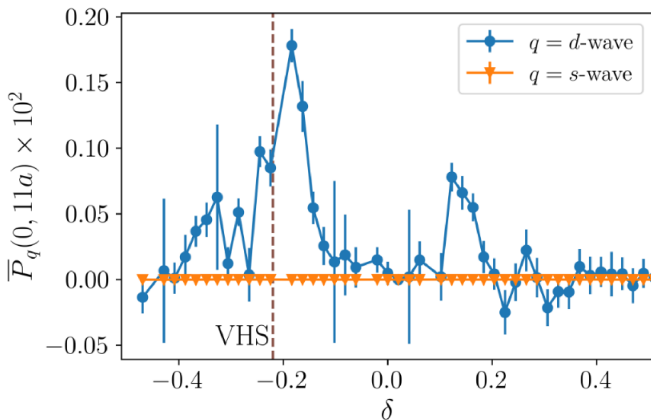
$$\mu(\delta) \approx \frac{E(N_{el}) - E(N_{el} - \Delta N_{el})}{\Delta N_{el}}, \Delta_{CG} = \lim_{\delta \rightarrow 0^-} \mu(\delta) - \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \mu(\delta)$$



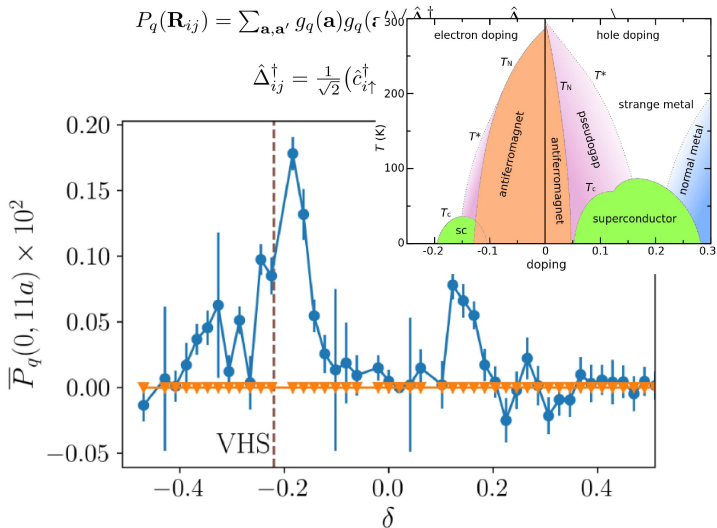
AB, M.P. Nowak, M. Zegrodnik, Physical Review B 104, 245430 (2021)

$$P_q(\mathbf{R}_{ij}) = \sum_{\mathbf{a}, \mathbf{a}'} g_q(\mathbf{a}) g_q(\mathbf{a}') \langle \hat{\Delta}_{i,f(\mathbf{R}_i+\mathbf{a})}^\dagger \hat{\Delta}_{j,f(\mathbf{R}_j+\mathbf{a}')} \rangle$$

$$\hat{\Delta}_{ij}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger)$$



Parowanie nadprzewodzące



Konkluzje

Konkluzje

- Sygnatury przejścia Motta w niskowymiarowych układach wodorowych, atomizacja; wpływ korelacji na dystosję Peierlsa
- Charakterystyka podstawowych własności elektronowych płaszczyzn miedziowo-tlenowych w spójnym obrazie wariacyjnym
- Wykazanie możliwości skonstruowania sztucznej nano-sieci wykazującej własności obserwowanych w związkach na bazie miedzi

- Sygnatury przejścia Motta w niskowymiarowych układach wodorowych, atomizacja; wpływ korelacji na dystosję Peierlsa
 - Charakterystyka podstawowych własności elektronowych płaszczyzn miedziowo-tlenowych w spójnym obrazie wariacyjnym
 - Wykazanie możliwości skonstruowania sztucznej nano-sieci wykazującej własności obserwowanych w związkach na bazie miedzi
-
- ✓ Korelacje elektronowe istotne w różnorodnych układach (uniwersalność)
 - ✓ Przenikanie zagadnień fizycznych z metodologicznymi
 - ✓ Złożoność - problem z intuicyjnością
 - ✓ ...intuicyjność - obraz Wanniera
 - ✓ Relacja między E_{e-e} a $E_{kin} \rightarrow$ uniwersalność ($U/W > 1$)

Dziękuję za uwagę
andrzej.biborski@agh.edu.pl