

Posudek školitele na disertaci RNDr. Pavla Augustinského:

Stability of Fermi liquid with respect to dynamical fluctuations in strongly correlated electron systems

Cílem disertační práce Pavla Augustinského bylo vypracovat přibližné analyticko-numerické schéma výpočtu vlivu silné elektronové korelace na stabilitu Fermiho kapaliny v těsnovazebných modelech Hubbardova typu. Podstatnou omezující podmínkou pro konstrukci přibližných řešení modelových situací byla konsistence v režimu Fermiho kapaliny, tj., zachování podstatných kvalitativních vlastností tohoto stavu korelovaných elektronů. Jsou známy vlivy, které díky prostorově dalekodosahovým korelacím vedou na kritické narušení režimu Fermiho kapaliny a vznik statického dalekodosahového uspořádání. Tento způsob narušení stability Fermiho kapaliny však nebyl cílem zkoumání disertace P. Augustinského. V disertaci se autor zaměřil na *vliv dynamických (časových) lokálních fluktuací*, které mohou vést na přechod Fermiho kapaliny do izolátorového stavu.

Fundamentálním modelem pro studium dynamických efektů silných elektronových korelací je Andersonův model magnetické příměsi v kovové matici. Tento model ve speciálním případě umožňuje nalézt základní stav pro libovolnou sílu elektronové interakce exaktně. Lokální Fermiho kapalina je stabilní, ale v limitě velmi silné elektronové korelace je pozorován tzv. Kondův jev, který se projevuje ve formování kvazičásticového rezonančního energetického pásu kolem Fermiho meze, jehož šířka je nepřímo úměrná době života elektron-děrového vázaného stavu. Exaktní algebraické řešení však není použitelné na dynamické veličiny a spektrální funkce. Proto se vyvíjí velké úsilí vytvořit spolehlivá přibližná řešení dynamických vlastností modelů korelovaných elektronů. Kondova limita v příměsovém modelu slouží jako jedno z nejdůležitějších kritérií spolehlivosti přibližných metod započtení vlivu silných elektronových korelací. Vypracované schéma přibližného výpočtu dynamických efektů elektronových korelací ve Fermiho kapalině bylo prezentováno na příměsovém modelu proto, aby se testovala jeho schopnost kvalitativně správně reprodukovat Kondovu limitu. Metoda konstrukce přibližné teorie se však neomezuje pouze na jednoorbitálový Andersonův příměsový model. Díky formulaci v řeči Greenových funkcí a Feynmanových diagramů bylo možné vytvořené dynamické přiblížení rozšířit jak na mřížkové modely v rámci tzv. dynamické teorie středního pole, tak na víceorbitálové modely korelovaných elektronů.

Práce je rozdělena do pěti kapitol a závěrečného shrnutí. První dvě jsou úvodem do modelu a metodiky. V první kapitole je shrnuta historie a význam Andersonova modelu magnetické příměsi v nemagnetickém kovu pro konstrukci dynamické teorie středního pole. Jsou zde taky krátce diskutovány dostupné analytické a numerické metody získání (přibližného) řešení. Druhá kapitola pak obsírněji vymezuje metodický rámec teoretického studia dynamických fluktuací v příměsových modelech, kterým je technika mnohočásticových Greenových funkcí a Feynmanových diagramů. Na rozdíl od běžných metod, Feynmanovy diagramy jsou zde použity ke konstrukci selfkonsistentního přiblížení na dvoučásticové úrovni v rámci tzv. parketových rovnic.

Vlastní přínos disertanta je soustředěn v kapitolách tři až pět. Ve třetí kapitole je detailně vysvětleno schéma konstrukce zjednodušených parketových rovnic pro jednoorbitální model. Přiblížení je konstruováno tak, aby se udržela analytická kontrola singularity v Betheho-Salpeterově rovnici. Tím se podařilo získat analytický asymptotický vztah pro šířku Kondova rezonančního pásu. Mohli jsme tak prokázat, že zjednodušené parketové rovnice kvalitativně reprodukuje exaktní řešení, jeho univerzální část. Přínos disertanta zde spočíval hlavně ve vytvoření numericky stabilního iteračního schématu výpočtu selfkonsistentních rovnic pro vrcholové funkce a z nich odvozené jednočásticové selfenergie pro silnou elektronovou korelaci v režimu Fermiho kapaliny. Stabilní numerické řešení bylo získáno jak pro příměsový model tak pro dynamickou teorii středního pole.

Ve čtvrté kapitole jsou zjednodušené parketové rovnice rozšířeny na víceorbitální modely. Detailně je pak studován dvouorbitální model, který umožňuje zkoumání vlivu Hundova výměnného členu na šířku Kondova rezonančního pásu a vznik orbitálního rozštěpení, přechod kov-izolátor, v krystalovém poli. Tento přechod, který může být v parketovém přístupu pouze nekritický, byl v disertaci detailně popsán, včetně chování Kondova rezonančního pásu. Kromě vytvoření úplného numerického schématu řešení víceorbitálních zjednodušených parketových rovnic se disertant podílel taky na formulaci konstrukce obecné maticové reprezentace multiorbitálního přiblížení.

Třebaže numerická náročnost řešení zjednodušených parketových rovnic není srovnatelná s rozsáhlými simulacemi jako jsou numerická renormalizační grupa nebo kvantové Monte Carlo, dosažení dostatečné numerické přesnosti a stability iteračních schémat v režimu silné elektronové korelace vyžadovalo vyvinout nové náročné postupy a modifikace existujících numerických procedur. Detaily numerických řešení využívaných v disertaci jsou vysvětleny v poslední páté kapitole.

Téma disertační práce bylo náročné hlavně díky tomu, že bylo potřeba dotáhnout myšlenku nutné edukce složitosti parketových rovnic až do numericky stabilní iterativní procedury vedoucí na řešení, které kvalitativně správně reprodukuje Kondovu limitu silných elektronových korelací. To se úspěšně podařilo výhradně díky schopnostem a programovací zručnosti disertanta. Jako nejtěžší část disertace se ukázalo zobecnění vytvořeného přiblíženého schématu na víceorbitální modely. Tento krok byl taky časově nejnáročnější. V tomto zobecnění byl podíl práce P. Augustinského i v analytické části výrazný. Zadostiučiněním za toto úsilí bylo dosažení poměrně dobré kvantitativní shody výsledků získaných ze zjednodušených parketových rovnic dvouorbitálního modelu s přesnějšími, ale numericky mnohem náročnějšími postupy.

Během doktorandského studia i vypracování disertační práce projevoval P. Augustinský dostatečnou samostatnost. Více mu vychovalo řešení technických problémů spojených s numerickou implementací selfkonsistence parketových rovnic než vyvíjení nových analytických metod a hledání okruhu fyzikálních problémů, kde lze zjednodušené parketové rovnice, nebo jejich případné vylepšení, využít. Výsledky disertační práce a významný podíl disertanta na společně publikovaných článcích prokazují, že RNDr. Pavel Augustinský je schopen samostatně řešit problémy a zapojit se do výzkumné práce.

Doporučuji proto, aby po úspěšné obhajobě byla P. Augustinskému udělena vědecká hodnost PhD.

V Praze, dne 11. listopadu 2011



Prof. RNDr. Václav Janiš, DrSc.