

I. RAPORTARE ȘTIINȚIFICĂ

FAZA DE EXECUȚIE NR. 2

CU TITLUL Aplicație a teoriei magnetoconductanței la sisteme topologice multibandă.

☒ **RFA – raport final de activitate (numai pentru faza finală)**

RFA – Raport Final de activitate

- **Titlul proiectului^a** Teoria cuantică a magnetotransportului în câmpuri slabe pentru sisteme topologice multibandă [Quantum theory of weak field magnetotransport for topological multiband systems]
- **Nr. contractului** 15BMFR din 26/08/2024
- **Anul finalizării** 2025
- **Durata proiectului** 26/08/2024 – 31/12/2025 (16 luni)
- **Partener român^b** Claudiu Ortensie Filip, Director General al Institutului Național de Cercetare-Dezvoltare de Tehnici Izotopice și Moleculare, Cluj-Napoca, România
- **Director de proiect^c** Doru Cristian Sticleț, Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare de Tehnici Izotopice și Moleculare, Cluj-Napoca, România
- **Partener străin^d** Frédéric Piéchon, Centre National de la Recherche Scientifique și Université Paris-Saclay
- **Obiective generale urmărite**
 1. Dezvoltarea unei teorii perturbative microscopică diagramatică a magnetotransportului în sisteme multibandă, până la ordinul doi în câmpul magnetic.
 2. Aplicarea formalismului de magnetotransport cuantic obținut pe diferite modele de materiale topologice de interes. Aici, un obiectiv important va fi acela de a evidenția toate corecțiile cuantice care nu pot fi obținute printr-o abordare Boltzmann semiclassicală.
- **Descrierea științifică și tehnică a rezultatelor și gradul de realizare a obiectivelor**

Obiectivul principal este obținerea unei teorii generale pentru magnetoconductanță la ordinul doi în câmpul magnetic pe sisteme bidimensionale. Ideea centrală a fost dezvoltarea în calculul perturbativ într-o teorie invariantă la etalonare, prin expansiune în fluxul magnetic ce penetrează suprafața materialului. În această teorie, cele două funcții Green care intră în corelatorul viteză-viteză sunt dezvoltate în ordinul doi în câmpul magnetic, și adițional nucleul este modificată de o fază care depinde de fluxul magnetic. Aceasta din urmă este dezvoltată și ea în câmp magnetic mic. Am exprimat termenii din teoria perturbației în funcție de cantități geometrice precum curbura Berry și tensorul geometric.

În cadrul proiectului am urmat obiectivele propuse și am obținut mai multe rezultate originale:

 1. Formularea unui formalism complet pentru magnetoconductanță la ordinul doi în câmp magnetic, pornind din teoria Kubo și folosind o expansiune sistematică în fluxul magnetic.
 2. Separarea clară între contribuțiile disipative și nedisipative în sisteme cu o singură bandă și extinderea la sisteme multibandă, unde există contribuții cuantice absente în teoria semiclassicală Boltzmann.
 3. Introducerea unei noi metode analitice prin care corelatorul viteză-viteză este descompus într-un set de blocuri matriciale cu interpretare geometrică, exprimate în termeni de curbura Berry și tensorul de metrică cuantică.
 4. Realizarea unui pachet software în Mathematica pentru tratarea sistemelor multibandă, care permite efectuarea calculelor simbolice complexe pentru urma produselor de funcții Green care apar în expansiunea în câmp magnetic.

5. Obținerea analitică a limitei de câmp slab pornind de la modele 2D exact solvabile care prezintă nivele Landau în câmp magnetic înalt, folosind metode de sumare Poisson și dezvoltări Euler–Maclaurin.

Aceste rezultate reprezintă un avans în teoria transportului electronic în câmp magnetic și stabilesc *Gradul de realizare al proiectului*. Obiectivele propuse au fost atinse și activitățile propuse pe proiect au fost în majoritate lor îndeplinite..

Activitatea 1.1 a fost realizată integral. A fost dezvoltată o teorie completă a magnetoconductanței pentru o singură bandă.

Activitatea 1.2 a fost realizată integral. Calculul de magnetoconductanță pentru două benzi a fost finalizat. Pentru sisteme multibandă (mai mult de 2 benzi) am obținut structura generală a teoriei perturbației.

Activitatea 2.1 a fost realizată integral. A fost dezvoltat software-ului simbolic pentru corelatori viteză-viteză în sisteme multibandă.

Activitatea 2.2 este în curs de realizare. Rămâne de stabilit complet comparația cu teoria clasică Boltzmann.

- **Vizite de lucru efectuate pe durata proiectului bilateral**

Au fost efectuate 4 vizite de lucru pe durata proiectului, 2 vizite de către partenerul francez în România și 2 de către partenerul român în Franța.

Vizitele partenerului român:

06/10/2024 – 20/10/2024

29/06/2025 – 13/07/2025

Vizitele partenerului francez:

21/09/2024 – 4/10/2024

22/09/2025 – 03/10/2025

- **Posibilități de valorificare economică a rezultatelor obținute**

Cercetarea este e natură fundamentală cu posibilități reduse de valorificare pe termen scurt și mediu. Pe termen lung, rezultatele obținute au potențial de aplicabilitate în proiectarea de materiale electronice avansate, unde efectele magnetice de ordin înalt influențează performanța pentru senzori magnetici, materiale pentru spintronică și dispozitive cuantice 2D. Totodată pot juca un rol în optimizarea modelelor numerice folosite în industrie, prin furnizarea unor formule precise și verificabile pentru conductivități în câmp magnetic. Instrumentele software simbolice dezvoltate în cadrul acestui proiect au potențialul de a fi extinse și rafinate în continuare, până la un nivel la care ar putea fi utilizate inclusiv în aplicații industriale.

- **Rezumat în română**

Acest proiect își propune elaborarea unei teorii generale și invariantă la etalonare pentru magnetoconductanța la ordinul doi în câmp magnetic slab în materiale bidimensionale, depășind atât limitele modelelor actuale, cât și ale formalismului semiclasical Boltzmann utilizat pe scară largă în electronică și fizica materialelor.

Proiectul aduce mai multe rezultate originale:

1. Formularea unui formalism complet pentru magnetoconductanță la ordinul doi în câmp magnetic, pornind din teoria Kubo și folosind o expansiune sistematică în fluxul magnetic.

2. Separarea clară între contribuțiile disipative și nedisipative în sisteme cu o singură bandă și extinderea la sisteme multibandă, unde există contribuții cuantice absente în teoria semiclassicală Boltzmann.

3. Introducerea unei noi metode analitice prin care corelatorul viteză-viteză este descompus într-un set de blocuri matriciale cu interpretare geometrică, exprimate în termeni de curbura Berry și tensorul de metrică cuantică.

4. Realizarea unui pachet software în Mathematica pentru tratarea sistemelor multibandă, care permite efectuarea calculelor simbolice complexe pentru urma produselor de funcții Green care apar în expansiunea în câmp magnetic.

5. Obținerea analitică a limitei de câmp slab pornind de la modele 2D exact solvabile care prezintă nivele Landau în câmp magnetic înalt, folosind metode de sumare Poisson și dezvoltări Euler–Maclaurin.

Aceste rezultate reprezintă un avans în teoria transportului electronic în câmp magnetic și stabilesc o bază pentru analize precise ale sistemelor multibandă reale (grafen, materiale topologice, semiconductori 2D).

Pe term scurt și mediu, rezultatele au potențial de aplicabilitate mic datorită naturii teoretice a studiilor efectuate. Pe termen lung, ele au potențial de aplicabilitate în proiectarea de materiale electronice avansate, unde efectele magnetice de ordin înalt influențează performanța pentru senzori magnetici, materiale pentru spintronică și dispozitive cuantice 2D. Totodată pot juca un rol în optimizarea modelelor numerice folosite în industrie, prin furnizarea unor formule precise și verificabile pentru conductivități în câmp magnetic. Totodată, instrumentele software simbolice dezvoltate în cadrul acestui proiect au potențialul de a fi extinse și rafinate în continuare, până la un nivel la care ar putea fi utilizate inclusiv în aplicații industriale.

La nivel de impact social, sperăm ca proiectul să conducă la consolidarea colaborării internaționale România–Franța. Colaborarea va avea impact în transferul de cunoștințe către studenți și doctoranzi, prin dezvoltarea de instrumente accesibile pentru predarea geometriei cuantice și a formalismului Kubo. Aici partea franceză are un avans prin implicarea reprezentatului francez în susținerea de stagii și un doctorand pe tematici apropiate. Astfel, proiectul de față promovează cercetarea fundamentală în domenii cu potențial aplicativ ridicat.

Gradul de realizare al proiectului. Obiectivele propuse au fost atinse și activitățile propuse pe proiect au fost în marea lor majoritate îndeplinite.

Activitatea 1.1 a fost realizată integral. A fost dezvoltată o teorie completă a magnetoconductanței pentru o singură bandă.

Activitatea 1.2 a fost realizată integral. Calculul de magnetoconductanță pentru două benzi a fost finalizat. Pentru sisteme multibandă (mai mult de 2 benzi) am obținut structura generală a teoriei perturbației.

Activitatea 2.1 a fost realizată integral. A fost dezvoltat software-ului simbolic pentru corelatori viteză-viteză în sisteme multibandă.

Activitatea 2.2 este în curs de realizare. Rămâne de stabilit complet comparația cu teoria clasică Boltzmann.

• Rezumat în engleză

This project aims to develop a general, gauge-invariant theory of magnetoconductivity to second order in a weak magnetic field for two-dimensional materials, surpassing the limitations of current models as well as the widely used semiclassical Boltzmann formalism in electronics and materials physics.

The project yields several original results:

1. A complete formalism for second-order magnetoconductivity in a magnetic field, derived from the Kubo theory and based on a systematic expansion in the magnetic flux.
2. A clear separation of dissipative and non-dissipative contributions in single-band systems, and extended to multiband systems where some purely quantum contributions are absent in semiclassical Boltzmann theory.
3. The introduction of a new analytical method in which the velocity-velocity correlator is decomposed into a set of matrix blocks with a geometric interpretation, expressed in terms of Berry curvature and the quantum metric tensor.
4. The development of a Mathematica software package for handling multiband systems, enabling complex symbolic computations of traces over products of Green's functions that appear in the magnetic-field expansion.
5. The analytical derivation of the weak-field limit starting from exactly solvable 2D models with Landau levels at high magnetic fields, using Poisson summation techniques and Euler–Maclaurin expansions.

These results represent a significant advance in the theory of electronic transport in magnetic fields and establish a foundation for precise analysis of real multiband systems (graphene, topological materials, 2D semiconductors).

In the short- and medium-term, the results have limited direct applicability due to their theoretical nature. In the long term, however, they have potential applications in the design of advanced electronic materials, where higher-order magnetic effects influence the performance of magnetic sensors, spintronic materials, and 2D quantum devices. They may also play a role in optimizing numerical models used in industry by providing precise and verifiable formulas for conductivities in magnetic fields. Moreover, the symbolic software tools developed within this project have the potential to be further extended and refined, reaching a level where they could even be used in industrial applications.

From a social impact perspective, we hope the project will strengthen Romania–France international collaboration. This collaboration will facilitate knowledge transfer to students and PhD candidates through the development of accessible tools for teaching quantum geometry and the Kubo formalism. The French partner brings experience through the supervision of internships and a PhD student on related topics. Overall, the project promotes fundamental research in areas with high potential for practical applications.

Project Completion Status. The proposed objectives have been achieved, and the majority of planned project activities have been completed:

Activity 1.1. Fully completed. A complete single-band theory is available, including perturbative calculations in a magnetic field.

Activity 1.2: Fully completed. Magnetoconductivity calculations for two bands have been finalized. For multiband systems (more than two bands), the general perturbation theory structure is established.

Activity 2.1. Fully completed. Symbolic software for velocity-velocity correlators has been developed.

Activity 2.2. In progress. A full comparison with classical Boltzmann theory remains to be established.

- **Indicatorii finali ai proiectului.**

Articole publicate

1. D. Sticlet, B. Dóra, D. Szombathy, G. Zaránd, C. P. Moca, *Nonstabilizerness in open XXZ spin chains: Universal scaling and dynamics*, [Phys. Rev. Research 7, 043130 \(2025\)](#).
2. D. Sticlet, R. Tetea, Coriolan Tiușan, Skyrmonic qubits stabilized by Dzyaloshinskii-Moriya interaction as platforms for qubits and quantum gates, [Phys. Rev. B 112, 195435 \(2025\)](#).

Articole în evaluare

1. C. P. Moca; D. Sticlet, D. Balázs, Non-stabilizerness as a Diagnostic of Criticality and Exceptional Points in Non-Hermitian Spin Chains, [arXiv:2510.17248 \(2025\)](#). În evaluare la revista [Quantum](#).
2. C. P. Moca, D. Sticlet, B. Dóra, A. Valli, D. Szombathy, G. Zaránd, Non-stabilizerness generation in a multi-particle quantum walk, [arXiv:2510.17248 \(2025\)](#). În evaluare la Phys. Rev. Lett.

Conferințe și seminarii

1. D. Sticlet, *Stabilizer Rényi entropy in many-body quantum spin systems*, seminar științific cu ocazia vizitei partenerului român în Franța în cadrul Séminaire de Théorie de la Matière Condensée sur le Plateau, un seminar științific organizat între laboratoarele universității Paris-Saclay în 3 iulie 2025.
2. D. Sticlet, *Nonstabilizerness in many-body quantum systems*, Processes in Isotopes and Molecules, Cluj-Napoca, România, 16-19 septembrie 2025 (prezentare orală).
3. F. Piéchon, *Local orbital magnetization: Local Berry curvature*, GDR MEETICC Plenary Conference, Banyuls-sur-Mer, Franța, noiembrie 17-21, 2025 (prezentare orală).
4. D. Sticlet, *Stabilizer Rényi entropy in one-dimensional quantum spin systems*, The 17th International Conference on Physics of Advanced Materials, Hamamatsu, Japonia, 16-23 noiembrie 2025 (prezentare orală, invitată, online).

• Indicatori de realizare a proiectului

Tipul indicatorilor	Denumirea indicatorilor	UM/an	Valoare
Indicatori de rezultat	Articole publicate in reviste indexate ISI	Nr.	2
	Articole acceptate in reviste indexate ISI	Nr.	0
	Articole in evaluare in reviste indexate ISI	Nr.	2
	Articole publicate in reviste indexate in baze de date internationale	Nr.	0
	Articole acceptate in reviste indexate in baze de date internationale	Nr.	0
	Articole in evaluare in reviste indexate in baze de date internationale	Nr.	0
	Brevete (sau cereri de brevet) Nationale	Nr.	0
	Brevete (sau cereri de brevet) Internationale	Nr.	0

	Participari conferinte	Nr.	1
	Carti	Nr.	0
	Capitole de carte	Nr.	0
	Produse	Nr.	0
	Produse Informatice	Nr.	0
	Tehnologii	Nr.	0
	Servicii	Nr.	0
	Servicii Informatice	Nr.	0
	Studii	Nr.	0
	Alte Rezultate. Seminar științific	Nr.	1