

Kraków, 25 czerwca 2018 r.

prof. dr hab. Włodzimierz Wójcik
Instytut Fizyki
Wydział Fizyki, Matematyki i Informatyki
Politechnika Krakowska
ul. Podchorążych 1
30-084 Kraków

Recenzja rozprawy doktorskiej Pani **mgr Ewy Kądziaławy-Major**,
zatytułowanej „**Exchange Interactions, Electron States, and
Pairing of Electrons in Correlated and Hybridized Systems,**”
przedstawiona Radzie Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki
Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego

Rozprawa doktorska Pani mgr Ewy Kądziaławy-Major wykonana pod kierunkiem
prof. dra hab. Józefa Spałka, promotor pomocniczy dr inż. Maciej Fidrysiak, dotyczy głównie
parowania trypletowego w przestrzeni rzeczywistej oraz koegzystencji takiego stanu
nadprzewodzącego z ferromagnetyzmem pasmowym lub prawie zlokalizowanych silnie
skorelowanych elektronów, zastosowanej do analizy diagramu fazowego UGe₂.

Recenzowana praca napisana jest w języku angielskim. Składa się z czterech
rozdziałów, podsumowania, pięciu dodatków, spisu literatury oraz ze spisu używanych
oznaczeń. Zawiera 106 stron oraz 97 pozycji literaturowych.

Dorobek naukowy doktorantki obejmuje dwie opublikowane prace w czasopismach z
listy filadelfijskiej:

1. E. Kądziaława-Major, M. Fidrysiak, P. Kubiczek, and J. Spałek. *Phys. Rev. B* **97**,
224519 (2018) oraz
2. E. Kądziaława-Major and J. Spałek. *Acta Phys. Pol. A* **126**, 100 (2014).

Część oryginalnych wyników zawartych w rozprawie nie została jeszcze opublikowana i
mam nadzieję, że będą one treścią następnych prac. Praca jest powiązana z rozprawami dra
Marcina Wysokińskiego i dra Marcina Abrama, które jednakże dotyczyły
niezdegenerowanego modelu sieci Andersona i wyłącznie magnetyzmu.

Rozprawę rozpoczyna Wstęp, w którym w sposób bardzo jasny sformułowano
najważniejsze idee oraz zjawiska związane w szerszym kontekście z tematyką rozprawy.
Bardzo zwięźle przedstawiono różne rodzaje faz magnetycznych oraz historię
nadprzewodnictwa i nadciekłości oraz nadprzewodnictwa w układach ciężkofermionowych.
Szczegółowo omówiono własności UGe₂, który wykazuje bogactwo faz magnetycznych i
nadprzewodzących oraz bardzo ciekawy efekt – współistnienie tych faz.

W rozdziale drugim zaproponowano orbitalnie zdegenerowany model sieciowy Andersona (cztero-orbitalowy) dla elektronów wyjściowych zlokalizowanych stanach ($5f$), jak i stanach pasmowych. Przyjęto dla każdego typu stanów podwójną degenerację orbitalną. Wydzielono wiodący kanał parowania poprzez wyrażenie lokalnego oddziaływania Hunda za pomocą operatorów parowania spinowo trypletowych. Włączenie do tego modelu degeneracji orbitalnej powoduje pojawienie się nowych rodzajów oddziaływań, tj. kulombowskiego oddziaływania międzyorbitalowego oraz bardzo ważnego sprzężenia typu Hunda. Wykazano, że oddziaływanie wymienne Hunda preferuje trypletowe spinowo oddziaływanie między elektronami typu f na różnych orbitalach tego samego atomu. Do rozwiązania tego modelu użyto statystycznie konsystentnego przybliżenia Gutzwillera, którego szczegóły wyjaśniono w dodatku B oraz dodatku D.

W trzecim, zasadniczym rozdziale rozprawy rozwiązano cztero-orbitalowy zdegenerowany model sieciowy Andersona i porównano otrzymane rezultaty z danymi eksperymentalnymi dla UGe_2 . Aby powiązać wyniki teoretyczne z danymi uzyskanymi z pomiarów ciśnieniowych przyjęto (po jasnej argumentacji), że hybrydyzacja jest monotoniczną funkcją ciśnienia. Obliczenia odtwarzają diagram fazowy UGe_2 w zerowym zewnętrznym polu magnetycznym, a mianowicie zarówno sekwencję magnetycznych przejść fazowych (FM2 – FM1 – PM), jak i trzy fazy nadprzewodzące A2, A1 oraz A. W 2000 r. odkryto w tym związku współistnienie nadprzewodnictwa i magnetyzmu. Faza nadprzewodząca pojawia się w fazie magnetycznej i obie te fazy jednocześnie zanikają dla krytycznej wartości ciśnienia. Aby pokazać istotny wpływ korelacji na stan podstawowy porównano otrzymane wyniki z rozwiązaniem Hartree-Focka (model typu BCS). Wyznaczono również zależność przerwy nadprzewodzącej od temperatury i pola magnetycznego (dodatek D).

Drugą część pracy czysto teoretyczną, stanowi rozdział czwarty. Zastosowano w nim zmodyfikowaną transformację Schrieffer-Wolffa w przestrzeni rzeczywistej w granicy silnych korelacji do sieciowego modelu Andersona. Dla przypadku niezdegenerowanego orbitalnie przeprowadzono transformację do czwartego rzędu, a w przypadku zdegenerowanego do drugiego rzędu. W wyrazie zawierającym hybrydyzację wkład odpowiedzialny za procesy wysokoenergetyczne został zastąpiony wirtualnymi procesami w wyższych rzędach. W przypadku niezdegenerowanego modelu sieciowego Andersona otrzymano efektywny hamiltonian Andersona-Kondo zawierający oddziaływanie wymiany Kondo oraz oddziaływanie typu Działoszyńskiego-Moriya w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń. Dla przypadku zdegenerowanego uzyskano efektywny hamiltonian zawierający przyciągające oddziaływanie międzyorbitalne oraz parowanie singletowe między elektronami zlokalizowanymi i elektronami pasmowymi oraz przeanalizowano wyniki dla różnej średniej liczby obsadzeń f elektronów

Podsumowanie zawiera szczegółową analizę uzyskanych wyników.

W pięciu dodatkach zawarto bardzo pomocne uzupełnienia, które pominięto w głównym tekście, a które pomagają istotnie w zrozumieniu pracy.

Przechodząc do oceny merytorycznej stwierdzam, że rozprawa Pani mgr Ewy Kądziaławy-Major cechuje się dużą oryginalnością. Jest kolejnym ważnym krokiem w zrozumieniu współistnienia magnetyzmu i nadprzewodnictwa. Jest pierwszym w literaturze światowej wyjaśnieniem obserwowanych faz w UGe2 w ramach, co trzeba podkreślić, spójnego teoretycznego podejścia. Z wielu uzyskanych oryginalnych wyników wyróżniłbym także identyfikację po raz pierwszy granicy metalu Hunda w analizowanym związku. Trzeba podkreślić, że odtworzenie diagramu fazowego UGe2 w części, gdzie współistnieje koegzystencja faz jest potwierdzeniem mechanizmu parowania opartego na korelacjach w przestrzeni rzeczywistej zaproponowanego 8 lat temu przez prof. Józefa Spałka. Postęp w konkretnych obliczeniach diagramu fazowego nie byłby możliwy także bez techniki tzw. statystycznego konsystentnego przybliżenia Gutzwillera sformułowanej w zespole prof. Józefa Spałka.

Uważam, że nie ma potrzeby wchodzenia w analizę szczegółów rozwiązań, gdyż zostały one dobrze przedstawione w rozprawie, a ograniczę się tylko do istotnych wątków.

Na podkreślenie zasługuje fakt, że doktorantka przeprowadziła obliczenia dla kwazi-dwuwymiarowej gęstości stanów dla związku UGe2. Gdyby porównać te obliczenia z obliczeniami ze stałą gęstością stanów, byłoby możliwe oszacowanie wpływu gęstości stanów na badane efekty. Dodatkowym atutem rozprawy jest fakt, że włączono orbitalne stopnie swobody, zarówno dla elektronów zlokalizowanych, jak i dla elektronów pasmowych. Powodują one pojawienie się nowych typów oddziaływań: międzyorbitalnego kulombowskiego oddziaływania oraz sprzężenia Hunda. W takim układzie bezpośrednia ferromagnetyczna wymiana faworyzuje tworzenie międzyorbitalowej spinowo trypletowej konfiguracji wynikającej z reguł Hunda (rola korelacji dla JH jest bardzo istotna).

Powstaje pytanie, czy mechanizm parowania trypletowego w przestrzeni rzeczywistej znajdzie potwierdzenie w układach, gdzie występuje koegzystencja nadprzewodnictwa oraz słabego wędrownego ferromagnetyzmu np. UCoGe, URhGe czy UIr. Analiza tego typu byłaby wskazana, żeby ocenić czy sugerowany inny mechanizmu parowania oparty na fluktuacjach spinowych może mieć miejsce. Czy da się połączyć fluktuacje spinowe z regułą Hunda?

Bardzo ciekawym wynikiem drugiej części rozprawy jest otrzymanie w hamiltonianie efektywnym wkładu pochodzącego od oddziaływania Działoszyńskiego-Moriyi po zastosowaniu zmodyfikowanej transformacji Schrieffera-Wolffa do niezdegenerowanego periodycznego sieciowego modelu Andersona.

Mam nadzieję, że dalsze badania, jak sugeruje doktorantka, związane z włączeniem sprzężenia spin-orbita, zbadanie wpływu pola magnetycznego szczególnie w fazie nadprzewodzącej oraz włączenie kwantowych fluktuacji spinowych będą kontynuowane.

Należy również podkreślić, że doktorantka pokonała duży stopień trudności związany także ze skomplikowanymi obliczeniami numerycznymi. Może dodatkowy komentarz dotyczący numerycznej minimalizacji z więzami byłby pomocny w lekturze rozprawy.

Jeśli chodzi o tekst to rozprawa zredagowana jest doskonale, jest dość obszerna i zawiera dużo wyników przedstawionych przejrzysto w formie graficznej. Rozprawa ta może służyć jako bardzo pomocne źródło do wejścia w aktualną tematykę koegzystencji magnetyzmu i nadprzewodnictwa.

Nie znalazłem żadnych uchybień redakcyjnych.

W podsumowaniu stwierdzam, że rozprawa doktorska Pani mgr Ewy Kądzielawy-Major stanowi **ważny krok na drodze do zrozumienia natury współistnienia magnetyzmu i trypletowego stanu nadprzewodzącego w silnie skorelowanych układach elektronowych**. Spełnia ona wymagania zarówno zwyczajowe, jak i formalne stawiane rozprawom doktorskim. Z przyjemnością wnoszę więc o dopuszczenie Pani mgr Ewy Kądzielawy-Major do dalszych etapów przewodu doktorskiego, w tym do publicznej obrony Jej rozprawy.



Włodzimierz Wójcik