



Mens agit molem

Zakład Teorii Fazy Skondensowanej UMCS
Condensed Matter Theory Department

ul. Radziszewskiego 10
20 031 Lublin, POLAND

<http://kft.umcs.lublin.pl/ztfs> fax: (+48 (0)81) 537 61 90

Prof. dr hab. Karol Izidor Wysokiński tel.(081)5376236 e.mail: karol@tytan.umcs.lublin.pl

Lublin dn. 22 czerwca 2018 r.

Opinia o pracy

doktorskiej pani **mgr Ewy Kądziaławy - Major**

pt. „*Exchange Interactions, Electronic States, and Pairing of Electrons in Correlated and Hybridized Systems*”

“*Oddziaływania wymiany, stany elektronowe i parowanie elektronów w skorelowanych układach z hybrydyzacją*”

Opiniowana rozprawa doktorska została wykonana na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie pod kierunkiem prof. dr hab. Józefa Spałka, który pełni funkcję promotora. Zgodnie z przepisami odpowiedniej ustawy funkcję promotora pomocniczego pełni w tym przewodzie dr inż. Maciej Fidrysiak. Praca została napisana w języku angielskim.

Nie mam większych uwag do strony redakcyjnej i językowej. W zasadzie nie oceniam pracy pod względem językowym, gdyż nie mam po temu uprawnień. Mogę jedynie stwierdzić, że autorka posługuje się ładnym, zrozumiałym językiem angielskim, a błędy językowe i literówki są bardzo rzadkie: dla kompletności stwierdzenia można przytoczyć bardzo nieliczne, niezupełnie poprawne, fragmenty tekstu; np. str. 16 „[...] , it becomes apparent that it supports [...]”, str. 19 „[...] acts on the each lattice site [...]”, str. 62 “occupancy is less or equal than 1”,

Warto już w tym miejscu wyraźnie podkreślić, że z różnych fragmentów tekstu jasno wynika iż doktorantka znakomicie zna zagadnienia, o których pisze. Jej – często dość marginalnie potraktowane – uwagi wskazują, że bardzo dobrze rozumie problemy badawcze, metody obliczeniowe i uzyskane wyniki. Praca doktorska zawiera zarówno wyniki złożonych obliczeń numerycznych jak i analitycznych. Te pierwsze związane są z ilościowym (lub półilościowym) opisem UGe_2 , a drugie dotyczą transformacji kanonicznej dla zdegenerowanego periodycznego modelu Andersona.

W znakomitej części rezultaty uzyskane i przedstawione w opiniowanej pracy doktorskiej pani Ewy Kądziaławy – Major dopiero oczekują na publikację. Do tekstu rozprawy dołączono jeden artykuł opublikowany w Acta Physica Polonica A, którego współautorem jest promotor – prof. Spałek. Publikacja ta jest pokłosiem Krajowej Konferencji Nadprzewodnictwa zorganizowanej w Zakopanem w 2013 roku. Do rozprawy dołączono też maszynopis drugiego artykułu przygotowanego do druku i zatytułowanego „*Spin – tripled paired phases inside ferromagnet induced by Hund’s rule coupling and electronic correlations: Application to UGe_2* ”. Współautorami tej drugiej pracy są: promotor i promotor pomocniczy oraz P. Ku-

biczek. Nie jest mi znana rola współautorów i ich wkład w powstanie omawianej publikacji, która jest wyraźnym podsumowaniem głównego rozdziału doktoratu.

Za najważniejszy wynik uzyskany przez doktorantkę w rozprawie uważam jakościowo poprawny opis pojawienia się nadprzewodnictwa w UGe_2 na granicy przemiany pomiędzy dwiema fazami ferromagnetycznymi (FM2 o dużym i FM1 o niższym momencie magnetycznym na atom Uranu, wynoszące odpowiednio 1.5 i 1 magnetonu Bohra) w ramach zdegenerowanego modelu Andersona z oddziaływaniem Hunda. Oddziaływanie Hunda oraz korelacje elektronowe stanowią mechanizm parowania w zaproponowanym modelu UGe_2 .

Taki mechanizm parowania oparty o oddziaływanie Hunda był wcześniej zaproponowany przez prof. Spałkę w ramach periodycznego, zdegenerowanego modelu Hubbarda (albo dwupasmowego modelu Hubbarda – Kanamori) i twórczo rozwinięty w rozprawie doktorskiej dr inż. Michała Zegrodnika wykonanej w tej samej grupie badawczej. Analiza układów ciężko – fermionowych w ramach modelu Andersona (niezdegenerowanego) była już wcześniej rozważana w grupie prof. Spałki m.in. w rozprawie doktorskiej pani dr Olgi Howczak. Opiniowana obecnie rozprawa doktorska to połączenie i rozwinięcie obu poprzednich idei (model sieci Andersona dla układów ciężko-fermionowych plus degeneracja orbitali i pojawiające się stąd oddziaływanie Hunda) oraz ich zastosowanie do opisu konkretnego materiału – UGe_2 , który od czasu odkrycia współistnienia magnetyzmu i nadprzewodnictwa w 2000 roku (Saxena et al. [15]) i późniejszych odkryć dwu wspomnianych magnetycznych przemian fazowych oraz punktu trój-krytycznego jest intensywnie badany zarówno doświadczalnie jak i teoretycznie. Wyniki pracy doktorskiej pani Ewy Kądziaławy – Major stanowią ważny przyczynek do dyskusji niskotemperaturowych właściwości tego interesującego związku.

Doktorat rozpoczyna się wstępem (Introduction), kończy krótkim podsumowaniem wraz z wnioskami i zawiera 3 dalsze rozdziały oraz cztery dodatki oraz spis literatury składający się z 97 pozycji. Omawiając pokrótce poszczególne fragmenty pracy będę jednocześnie zamieszczał moje uwagi oceniające. Ocenie podlegają wszystkie aspekty doktoratu: układ pracy, jej redakcja, prezentacja uzyskanych wyników, kompletność badań, itp.

Zgodnie z podtytułem wstępnego rozdziału *A brief overview of relevant phenomena*, autorka rzeczywiście bardzo pobieżnie przedstawia informacje o magnetyzmie, współistnieniu nadprzewodnictwa trypletowego i magnetyzmu i dualnego charakteru elektronów w układach ciężko fermionowych. Zabrakło tam rozróżnienia magnetyzmu zlokalizowanych momentów i wędrownego i założono, że czytelnik wie, iż w tej pracy w zasadzie tylko magnetyzm wędrowny jest rozważany. Na granicy poprawności są uwagi o bozonowym charakterze par elektronów i pojawieniu się nadprzewodnictwa, a przecież przejście od granicy BCS do granicy kondensacji BEC to poważny problem teoretyczny i eksperymentalny badany także w Polsce. Rozdział ten pozostawia u czytelnika mniej obeznanego z właściwościami UGe_2 pewien niedosyt: szczególnie w kontekście pobieżnie omówionego stanu nadprzewodzącego.

Autorka w kilku miejscach pracy używa określenia „teoria BCS” mając na myśli „model BCS”. To są dwa różne pojęcia: teoria BCS to idea, że nadprzewodnictwo związane jest z łamaniem symetrii cechowania $U(1)$ (przynajmniej tej symetrii) i jak dotąd nikt niczego innego nie wymyślił, a opis w przestrzeni wektora falowego lub w przestrzeni rzeczywistej czy łamanie dodatkowych symetrii to tylko ważne rozszerzenia oryginalnych pomysłów Bardeena, Coopera i Schrieffera. Natomiast „model BCS” oznacza założenie (lub fakt eksperymentalny), że nadprzewodnictwo indukowane jest efektywnym przyciągającym oddziaływaniem, którego źródłem jest oddziaływanie elektronowo – fononowe i że rozważana jest symetria s parametru porządku. Należy też zauważyć, że bardziej poprawnie jest mówić o parzystej lub nieparzystej części przestrzennej funkcji między – orbitalnej pary Coopera o trypletowej symetrii części spinowej, niż o symetrii s lub p (por. str. 18 pracy).

W drugim rozdziale pracy doktorantka wprowadza zdegenerowany cztero – orbitalowy model sieci Andersona i zapisuje go w przestrzeni rzeczywistej za pomocą operatorów parowania singletowego i trypletowego. Wprowadza też zewnętrzne pole magnetyczne ograniczając jego wpływ do wyrazu Zeemana. Rozdział kończy opis techniki obliczeniowej tzw. statystycznie konsystentnego przybliżenia Gutzwillera i analityczne wzory na współczynniki modyfikujące parametry modelu efektywnego bez korelacji i oddziaływań wielociałowych.

Zastosowanie tych idei do opisu przemian fazowych UGe_2 w funkcji zewnętrznego ciśnienia to treść głównego rozdziału rozprawy. Autorka dyskutuje kolejność faz pojawiających się wraz ze wzrostem przyłożonego ciśnienia i pojawienie się fazy nadprzewodzącej uzyskując – jak już wspomniałem wcześniej – znakomitą jakościową zgodność z wynikami doświadczenia. Porównania z eksperymentem dokonuje ona przy założeniu, że wpływ ciśnienia można symulować za pomocą wzrostu parametru hybrydyzacji. W szczególności faza nadprzewodząca pojawia się w otoczeniu punktu przemiany magnetycznej. To jest ważny i dobry wynik oraz wystarczające osiągnięcie rozprawy doktorskiej.

Przy tej okazji rodzi się szereg pytań szczegółowych dotyczących poczynionych założeń i przybliżeń. Po pierwsze autorka mierzy hybrydyzację V w jednostkach $t_c=t$, czyli całki przeskoaku dla elektronów zdelokalizowanych. Ciśnienie modyfikuje obie wielkości tzn. V i t w podobny (choć pewnie w nieco inny) sposób, a to oznacza, że V mierzone w jednostkach t bardzo słabo (jeśli w ogóle) zależy od ciśnienia. Czy Autorka ma lepsze argumenty za taką parametryzacją ciśnienia? Co więcej wydaje się, że można podać równie dobre albo nawet bardziej przekonujące argumenty, że wzrost ciśnienia zmniejsza wartość U i innych parametrów modelu mierzonych w pracy w jednostkach t .

Jeśli dobrze rozumiem wynik doświadczalny, to tam faza nadprzewodząca pojawia się symetrycznie wokół ciśnienia przemiany magnetycznej $FM2 \rightarrow FM1$. W pracy obszar nadprzewodzący występuje praktycznie tylko po jednej stronie tej przemiany. Jakie uogólnienia modelu powinny prowadzić do bardziej realistycznego wyniku? Chętnie też dowiedziałbym się o wadach i zaletach konkurencyjnych modeli nadprzewodnictwa w UGe_2 , m.in. prezentowanego w pracy Phys. Rev. Lett. **90**, 167005 (2003) i ewentualnie innych w porównaniu z obecną propozycją.

Kolejny problem recenzenta związany jest z założeniem degeneracji i potem równoważności zdegenerowanych orbitali. Nie jestem pewien, ale wydaje się, że dotyczy to zarówno orbitali f jak i c . Czy istnieją chemiczne argumenty za degeneracją orbitali c ? Jakich modyfikacji modelu i jakich zmian wyników należałoby oczekiwać przy założeniu degeneracji tylko orbitali f a pozostawieniu pojedynczego orbitala c ?

W kontekście powyższych pytań chętnie wysłucham dodatkowych argumentów uzasadniających model w trakcie publicznej obrony.

Czwarty rozdział pracy to wprowadzenie zmodyfikowanej transformacji Schrieffera – Wolffa do modelu Andersona bez i z degeneracją. Najważniejszym elementem analizy jest obserwacja, że wyrzutowane powinny być tylko procesy wysokoenergetyczne indukowane hybrydyzacją. To jest ważna obserwacja prowadząca do istotnego uogólnienia standardowej transformacji Schrieffera – Wolffa. Wydaje się, że jedynym argumentem za przedstawianiem w tym rozdziale pracy transformacji kanonicznej dla modelu niezdegenerowanego była chęć zaprezentowania zależności oddziaływania Kondo i nadwymiany f - f od hybrydyzacji i analiza wpływu procesów czwartego rzędu. Model ten był bowiem dokładnie zbadany wcześniej w innej pracy doktorskiej wykonanej w zespole prof. Spałka. Nawet przedstawiony w tym rozdziale diagram fazowy efektywnego modelu uzyskanego z niezdegenerowanego modelu Andersona na płaszczyźnie liczba elektronów hybrydyzacja zaczerpnięty został z pracy [59].

Mam świadomość, że pełna analiza uzyskanych w rozprawie modeli efektywnych dla układu zdegenerowanego w zupełności wystarczy na kolejną pracę doktorską.

Mimo, że część obliczeń analitycznych związanych z transformacją kanoniczną zdegenerowanego periodycznego modelu Andersona została wykonana na komputerze z pomocą ogólnie dostępnych pakietów obliczeń symbolicznych to duże wrażenie na recenzencie robią wyprowadzone w tym rozdziale pracy efektywne Hamiltoniany. Są one różne dla różnych obszarów parametrów wypełnienia pasm. Są też bardzo elegancko zapisane w postaci odzwierciedlającej różne fizyczne procesy dające do nich wkład. W szczególności pojawienie się w efektywnym Hamiltonianie (4.48) operatorów orbitalnego uporządkowania w obu kanałach f i c jest zaskakującym i interesującym, choć pewnie oczekiwanym wynikiem. Ciekaw jestem czy ten rezultat ma, a jeśli tak, to jakie odniesienie do badanych w innym kontekście modeli uporządkowań orbitalnych (model kompasu)? I jakie znaczenie – o ile da się to przewidzieć – może mieć ich obecność dla ewentualnych wyników analizy tego efektywnego Hamiltonianu?

Przygotowując pracę doktorską pani mgr Ewa Kądziaława – Major zapoznała się z wieloma zagadnieniami ważnymi dla współczesnej fizyki materii skondensowanej. Oprócz doświadczalnych wyników fizyko – chemicznych badań ciężkich fermionów, a w szczególności związku UGe_2 należy też wymienić teoretyczne metody opisu silnie oddziałujących elektronów, w tym zastosowaną w pracy technikę SGA i transformację kanoniczną uogólniającą transformację Schrieffera – Wolffa. Uzyskanie niektórych wyników wymagało zastosowania zaawansowanych metod numerycznych, inne obliczeń symbolicznych. Praca przekonuje, że autorka dobrze opanowała wszystkie te metody. Jak już wspomniałem na początku tej opinii bardzo wysoko cenię opis nadprzewodnictwa konkretnego materiału i propozycję modelu teoretycznego pozwalającego na jakościowo poprawne odtworzenie wyników doświadczalnych.

Reasumując stwierdzam, że recenzowana rozprawa spełnia zwyczajowe i ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie pani mgr Ewy Kądziaławy – Major do dalszych etapów przewodu doktorskiego.