

Lublin, 30 września 2016 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Marcina Abrama pt. „Nonstandard representation of correlated-fermion models and its application to description of magnetism and unconventional superconductivity”

Praca doktorska mgr. Marcina Abrama została wykonana w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie. Promotorem rozprawy jest prof. dr hab. Józef Spałek, natomiast promotorem pomocniczym jest dr inż. Michał Zegrodnik. Tematyka rozprawy dotyczy opisu silnie skorelowanych układów elektronowych, ze szczególnym uwzględnieniem nadprzewodnictwa (typu singletowego lub trypletowego), magnetyzmu (typu antyferromagnetycznego lub ferromagnetycznego) i uporządkowania ładunkowego. Doktorant zajął się wymienioną problematyką w kontekście wysokotemperaturowego nadprzewodnictwa tlenków miedzi oraz magnetyzmu współistniejącego z nadprzewodnictwem w ciężkofermionowym związku UGe_2 . Aktualnie problemy te należą do najpoważniejszych wyzwań teoretycznych fizyki ciała stałego.

Na treść przedłożonej rozprawy składa się cykl sześciu publikacji, w których udział Doktoranta (na podstawie załączonych deklaracji współautorów) można uznać jako kluczowy. Wspólnym elementem tych prac jest statystycznie konsystentna metoda Gultzwilera opracowana w grupie profesora Spałka jako rozwinięcie teorii średniego pola z uwzględnieniem warunków korelacyjnych dla spinowych i ładunkowych stopni swobody. Tego rodzaju nietrywialny formalizm został zastosowany przy współudziale Doktoranta do analizy nadprzewodnictwa, antyferromagnetyzmu i uporządkowania ładunkowego tlenków miedzi w ramach modelu $t - J$ i jego rozszerzeń. Do opisu ferromagnetyzmu w UGe_2 zastosowano natomiast periodyczny model Andersona. W obu przypadkach dobrany został realistyczny zestaw parametrów, umożliwiający konfrontację z danymi doświadczalnymi na poziomie ilościowym. Aspekt metodologiczny jest niewątpliwie bardzo cennym elementem przeprowadzonej analizy i stwarza perspektywę zastosowań do opisu także innych skorelowanych układów fizycznych.

Treść rozprawy doktorskiej przygotowanej przez mgr. M. Abrama w języku angielskim zawiera opis wstępny (strony 1-60), gdzie Doktorant przedstawił motywację swoich badań, nakreślił szkic metodologiczny oraz podał modele adekwatne do opisu badanych układów. Drugą część rozprawy (strony 61-134) stanowią publikacje, tzn. 6 artykułów spójnych tematycznie oraz 1 dodatkowy artykuł (świadczący o umiejętności Doktoranta do analitycznych i numerycznych obliczeń dla egzotycznych układów wielociałowych). W ostatniej części rozprawy (strona 135) Doktorant przedstawił krótkie podsumowanie wyników i wymienił szkic dalszych pokrewnych badań.

I. Celem pracy było zastosowanie wybranych modeli teoretycznych do opisu nadprzewodnictwa, uporządkowania magnetycznego (ferro- lub antyferromagnetycznego) oraz uporządkowania typu fali gęstości ładunku dla wybranych silnie skorelowanych układów fizycznych. Punktem wyjścia do analizy silnych korelacji był dla Doktoranta model Hubbarda i modele pokrewne, takie jak $t - J$, $t - J - U$ oraz $t - J - U - V$. Autor przedstawił najważniejsze cechy nadprzewodników wysokotemperaturowych, podkreślając m.in. warstwową strukturę krystaliczną, parametr porządku o symetrii fali d oraz niskie dolne pole krytyczne H_{c1} . Uzasadnił następnie, że efektywnym scenariuszem do opisu korelacji elektronowych realizowanych w płaszczyznach CuO_2 jest model Hubbarda z silnym potencjałem oddziaływań kulombowskich U i przedstawił ideę wyprowadzenia modelu $t - J$. Do bardziej realistycznego opisu uzasadnił, że w efektywny model jednopasmowy powinien uwzględniać oddziaływania wymienne włącznie z odpychaniem kulombowskim elektronów na węzle i między sąsiednimi węzłami sieci krystalicznej. Krótko przedstawił niedawne doniesienia o obecności fazy uporządkowania ładunkowego dla poszczególnych nadprzewodników wysokotemperaturowych. W kolejnych fragmentach opisu wstępnego Doktorant omówił ideę podejścia Gutzwillera oraz jej rozszerzenie do wersji statystycznie konsekwentnej. Efektywny Hamiltonian jest wówczas zredukowany to postaci jednocząstkowej, w której mnożniki Lagrange’a uwzględniają dodatkowe warunki (*constraints*) nałożone na procedurę Gutzwillera implikujące konsekwentność metody. Autor przytoczył następnie argumentację, że adekwatnym modelem do opisu faz magnetycznych ciężkofermionowego związku UGe_2 jest dwuskładnikowy scenariusz elektronów wędrownych współistniejących ze elektronami zlokalizowanymi, które są sprzężone ze sobą wyrazem hybrydyzacyjnym. Opis wstępny zawiera też techniczne uwagi nt. roli wyrazów trójwęzłowych w modelu $t - J$ i wyjaśnia niuanse (w tym niejednoznaczność) wyprowadzenia czynnika Gutzwillera.

II. Na drugą część pracy doktorskiej składa się cykl sześciu publikacji, dotyczących ilościowej analizy różnych faz uporządkowanych w silnie skorelowanych nadprzewodnikach wysokotemperaturowych oraz UGe_2 . Oto ważniejsze wyniki uzyskane w tych pracach.

1. W artykule Phys. Rev. B **88**, 094502 (2013) zbadano stan nadprzewodzący o symetrii parametru porządku typu fali d oraz określono możliwość współistnienia tej fazy z antyferromagnetyzmem. Do opisu zastosowano efektywny model $t - J - U$ z potencjałem

oddziaływania wymiennego $J = |t|/3$ (gdzie $|t| = 0,35$ eV). Do realistycznego opisu parowania singletowego/trypletowego i uwzględnienia uporządkowania antyferromagnetycznego wprowadzono silne oddziaływanie kulombowskie na węzle $U = 8 - 10$ eV, podając odnośniki literaturowe do podobnego postępowania. W schemacie statystycznie konsystentnego podejście Gutzwillera wprowadzono mnożniki Lagrange’a i uzyskano układ równań dla magnetyzacji, amplitudy parametru porządku singletowego oraz trypletowego parowania elektronów i magnetyzację podsieci. Rozpatrzono różne warianty sformułowania tych warunków. Wyniki dla $U = 12|t|$ wskazały, że antyferromagnetyzm współistnieje z trypletowym nadprzewodnictwem w zakresie koncentracji dziur od zera (tzn. fazy Motta) do około 0,6%. Przy zerowej koncentracji dziur stan nadprzewodzący występuje w zakresie potencjału kulombowskiego do wartości $10,6|t|$. Jest to faza tzw. nadprzewodnictwa pajęczynowego (*gossamer*) zaproponowanego przez Roberta Laughlina. Analiza singletowej fazy nadprzewodzącej dla szerokiego zakresu wartości potencjału kulombowskiego wykazała jej występowanie do około 35 % domieszkowania dziurami. Taka górna wartość krytyczna jest zgodna z wynikami doświadczalnymi dla nadprzewodników tlenków miedzi.

Jednoautorska praca opublikowana przez Doktoranta w Acta Phys. Polon. A **126**, A25 (2014) uogólniła formalizm na przypadek z przeskokiem t' do kolejnych sąsiednich węzłów. Doktorant wykazał, że t' nie zmienia jakościowych właściwości modelu $t - J - U$. Rozwiązując równania statystycznie konsystentnej metody Gutzwillera na sieci kwadratowej o rozmiarach 512×512 dla temperatury bliskiej zera bezwzględnej wykazał, że: a) obszar fazy magnetycznej przekrywa się z zakresem występowania nadprzewodnictwa trypletowego, b) krytyczna wartość koncentracji dziur (współistnienia antyferromagnetyzmu i nadprzewodnictwa) skaluje się liniowo z potencjałem oddziaływania wymiennego J , c) krytyczna wartość oddziaływania kulombowskiego dla fazy *gossamer* praktycznie nie zależy od przeskoku elektronów do dalszych sąsiadów (zmiana tej wartości wynosi około 1 %), d) krytyczne domieszkowanie dla fazy singletowej jest wrażliwe na t' , ale zmiana dla realistycznych parametrów nie przekracza 10 %. Doktorant zbadał diagram fazowy względem (T, δ) i wykazał zawężenie występowania fazy nadprzewodzącej.

Dalszą analizę stabilności nadprzewodnictwa opisanego w ramach rozszerzonego modelu $t - J$ przeprowadzono w preprincie arXiv:1607.05399v2, gdzie zbadano wpływ kulombowskich oddziaływań pomiędzy sąsiednimi węzłami sieci krystalicznej. W tym celu oprócz statystycznie konsystentnej metody Gutzwillera zastosowano diagramowe rozwinięcie dla funkcji falowej. Głównym celem tego projektu było określenie relacji pomiędzy nadprzewodnictwem (typu singletowego i trypletowego), antyferromagnetyzmem oraz uporządkowaniem ładunkowym (*charge density wave CDW*). W ostatnich kilku latach pojawiło się szereg faktów doświadczalnych, które wskazują na występowanie uporządkowania ładunkowego w bliskim otoczeniu fazy nadprzewodzącej (tuż poniżej optymalnego domieszkowania). W literaturze dyskutowana jest kwestia wzajemnej relacji (rywalizacji albo

współistnienia) między nadprzewodnictwem i CDW. Obliczenia Doktoranta dla modelu $t - J - U - V$ wykazały, że kulombowskie odpychanie między elektronami z sąsiednich węzłów 2-wymiarowej sieci kwadratowej wzmacnia fazę uporządkowania ładunkowego przy jednoczesnym tłumieniu nadprzewodnictwa singletowego. Wyniki uzyskane za pomocą statystycznie konsystentnej metody Gutzwillera pozwoliły na zawężenie fazy nadprzewodzącej do realistycznego zakresu koncentracji dziur (co jest np. widoczne dla $V = |t|$) ale faza uporządkowania ładunkowego wykształca się wokół koncentracji 47 %. Uwzględnienie rozwinięcia diagramowego daje pewne wzmocnienie parametru porządku singletowej fazy nadprzewodzącej (rysunek 4) i generuje obszar nadprzewodnictwa o charakterze odmiennym od BCS, który charakteryzuje się wzrostem energii kinetycznej w temperaturze przejścia. Doktorant podjął wstępną próbę realistycznej modulacji fali gęstości ładunkowej $(\frac{2\pi}{3}, 0)$ ale samozgodne obliczenia numeryczne wykraczały poza aktualne możliwości.

Kolejna grupa trzech publikacji dotyczy opisu ferromagnetyzmu w układach ciężkich fermionów. Główną inspiracją tych badań było odkrycie trypletowego nadprzewodnictwa w niskotemperaturowej części obszaru uporządkowania ferromagnetycznego w związku UGe_2 , gdzie obszar współistnienia zależy od temperatury i ciśnienia. Do opisu tego układu fizycznego zastosowano periodyczny model Andersona, interpretując rolę ciśnienia poprzez zmianę hybrydyzacji między elektronami szerokiego pasma z elektronami zlokalizowanymi. Przy pomocy statystycznie konsystentnego podejścia Gutzwillera wyprowadzono efektywny hamiltonian jednocząstkowy z warunkami (*constraints*) dla pomocniczych pól, które uwzględniają efekty korelacyjne ładunkowych i spinowych stopni swobody. Zestaw równań wyprowadzonych z minimalizacji energii swobodnej rozwiązano numerycznie dla 2-wymiarowej sieci kwadratowej o rozmiarze 512×512 i zadanej całkowitej koncentracji elektronów.

Pierwsza ze wskazanej grupy publikacji Phys. Rev. B **90**, 081114(R) (2014) dyskutuje wyniki dla temperatury (prawie) równej zeru bezwzględnemu. W uzyskanym diagramie fazowym stwierdzono obszar silnego ferromagnetyzmu FM2, słabego ferromagnetyzmu FM1 oraz fazy paramagnetycznej. Poszczególne fazy realizują się zależnie od całkowitej koncentracji elektronów i hybrydyzacji nośników. Szczegółowa analiza dla potencjału kulombowskiego $U = 5|t|$ i koncentracji $n = 1,6$ pozwoliła wyodrębnić różne typy fazy ferromagnetycznej na podstawie spinowo-zależnej gęstości stanów. Obszar silnego ferromagnetyzmu (FM2) dotyczy przypadku, gdy potencjał chemiczny (energia Fermiego) znajduje się w górnym podpasmie spinów większościowych i dolnym podpasmie spinów mniejszościowych. Faza słabego ferromagnetyzmu (FM1) pojawia się natomiast, gdy potencjał chemiczny jednego ze spinów jest w przerwie między podpasmami. Faza silnego magnetyzmu realizuje się w zakresie $|V| \leq |t|$, ale zewnętrzne pole magnetyczne (uwzględnione poprzez rozszczepienie Zeemana) nieco rozszerza zakres FM2 w stronę silniejszej hybrydyzacji. Nie podjęto niestety próby opisu trypletowego nadprzewodnictwa, ograniczając się jedynie do wskazania ewentualnego mechanizmu.

W kolejnym artykule Phys. Rev. B **91**, 081108(R) (2015) uogólniono wyniki wcześniejszej pracy na przypadek niezerowych temperatur. Diagram fazowy uzyskany we współrzędnych $p-H-T$ (gdzie rolę ciśnienia utożsamiono z hybrydyzacją $|V|$) poprawnie odtwarza sekwencję i charakter przejść fazowych obserwowanych doświadczalnie w UGe_2 . Wykazano obecność punktu potrójnego (TCP) i krytycznego punktu końcowego (CEP) oraz przewidziano nowy rodzaj kwantowego punktu krytycznego QCEP typu Lifszycza (odzielającego stany o różnych topologiach powierzchni Fermiego). W pobliżu QCEP realizuje się empirycznie obserwowana optymalna wartość przejścia do fazy trypletowego nadprzewodnictwa.

Artykuł opublikowany w Journ. Magn. & Magn. Mat. **400**, 27 (2016) przedstawia szczegółową analizę zależności przejść fazowych dla zmiennej koncentracji nośników n oraz czynnika Landégo g_f dla elektronów zlokalizowanych. Porównanie z wynikami doświadczalnymi wskazuje, że najlepszą zgodność uzyskuje się dla zestawu $n \approx 1,6$ i $g_f \approx 2$. W innych przypadkach dochodzi do przesunięcia zarówno punktu potrójnego TCP jak też przejścia metamagnetycznego CEP. Dobór parametrów dla periodycznego modelu Andersona (stosowany w dwóch wcześniejszych pracach) był więc ustalony optymalnie.

III. W krótkim podsumowaniu Doktorant podał ważniejsze wyniki swoich obliczeń. Jako ciekawe zagadnienia do przyszłej analizy wymienił kwestię współlistnienia nadprzewodnictwa z uporządkowaniem ładunkowym o realnej modulacji $(\frac{2}{3}\pi, 0)$ oraz potrzebę zastosowania diagramowego rozszerzenia dla gutzwillerowskiej funkcji falowej na przypadek uporządkowania AF oraz CDW.

Reasumując, mgr Marcin Abram przeprowadził cenną analizę silnie skorelowanych układów elektronowych i określił stabilność uporządkowania nadprzewodzącego, magnetycznego oraz ładunkowego w zależności od koncentracji nośników, temperatury, ciśnienia i pola magnetycznego. Na szczególne podkreślenie zasługuje satysfakcjonująca zgodność ilościowa uzyskanych wyników z danymi doświadczalnymi. Zarówno opis części wstępnej (I) jak też podsumowanie (III) są opracowane bardzo klarownie i zwięźle. Nie mam żadnych poważniejszych uwag do strony edytorskiej. Na zasadniczą część rozprawy doktorskiej (II) składają się oryginalne artykuły opublikowane w recenzowanych czasopismach o dużej renomie. Przedstawiony dorobek badawczy nie pozostawia najmniejszych wątpliwości, że mgr M. Abram spełnia formalne i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim w dziedzinie nauk fizycznych.

Na tej podstawie przekazuję wniosek do Rady Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie o dopuszczenie mgr. Marcina Abrama do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Ze względu na wyjątkowo bogaty dorobek badawczy Doktoranta i wysoką jakość uzyskanych wyników naukowych chciałbym jednocześnie sugerować wyróżnienie niniejszej rozprawy doktorskiej.

Jacek Domański