

Prof. dr hab. Marcin Mierzejewski
Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski w Katowicach

**Recenzja rozprawy doktorskiej
mgra Marcina Abrama**

**pt. *Nonstandard representation of Correlated-Fermion Models and its Application
to Description of Magnetism and Unconventional Superconductivity***

Rozprawa doktorska Pana mgra Marcina Abrama została przygotowana pod kierunkiem Prof. dr hab. Józefa Spałka. Zasadniczą część rozprawy stanowi spójny tematycznie zbiór pięciu opublikowanych artykułów naukowych oraz jedna praca, która od miesiąca jest dostępna w bazie internetowej *arXiv*. Wśród opublikowanych artykułów znajduje się monoautorska praca opublikowana w *Acta Physica Polonica A*. Mgr Marcin Abram jest pierwszym lub drugim autorem pozostałych publikacji, a do rozprawy doktorskiej dołączone zostały oświadczenia wszystkich współautorów o ich procentowym wkładzie w powstanie każdego z tych artykułów. Z oświadczeń jasno wynika, że mgr Marcin Abram wniósł dominujący lub przynajmniej bardzo istotny wkład, toteż zbudowanie rozprawy doktorskiej w oparciu o te artykuły nie budzi żadnych formalnych wątpliwości. Warto też podkreślić, że wszystkie opublikowane prace ukazały się w bardzo dobrych czasopismach. W szczególności, trzy z nich zostały opublikowane w *Physical Review B*, w tym jedna jako regularny artykuł, a dwie jako *Rapid Communications*. Oprócz prac wchodzących w skład rozprawy doktorskiej, mgr Marcin Abram jest współautorem dwuautorskiej pracy z zakresu fizyki ciekłych kryształów, która ukazała się w *Physical Review E*.

Recenzowane prace stanowią jednotematyczny cykl publikacji, w których badane są diagramy fazowe nadprzewodników z silnymi korelacjami elektronowymi. Połowa prac dotyczy wysokotemperaturowych nadprzewodników opisywanych zmodyfikowanymi hamiltonianami modelu t-J. Pozostałe prace dotyczą faz ferromagnetycznych obserwowanych w nadprzewodniku UGe₂ opisywanych w ramach dwuorbitalowego, periodycznego modelu Andersona. Wspólnym mianownikiem wszystkich badań prezentowanych w rozprawie jest metoda badawcza oparta na statystycznie konsystentnym przybliżeniu Gutzwillera, będąca ulepszoną wersją zrenormalizowanej teorii średniego pola. Konstruowanie diagramów fazowych w niskowymiarowych modelach z silnymi korelacjami elektronowymi od wielu lat stanowi istotne wyzwanie dla teorii ciała stałego i nie są znane żadne uniwersalne metody postępowania. W przypadku obu hamiltonianów badanych w rozprawie uzyskano dobrą (lub przynajmniej bardzo rozsądną) zgodność z wynikami

eksperymentalnymi, co w elegancki sposób demonstruje wszechstronność stosowanej metody oraz jej wysoką użyteczność w badaniach stabilności różnych faz występujących w układach silnie skorelowanych elektronowych. W mojej ocenie, jest to bardzo istotny rezultat, a jednocześnie najważniejszy wyniki rozprawy.

Rozprawa podzielona jest na dwie zasadnicze części. Pierwsza z nich ma charakter obszernego wstępu, w którym omówione zostały układy fizyczne, mikroskopowe modele oraz metoda obliczeniowa wykorzystywana w rozprawie. Druga część zawiera oryginalne publikacje naukowe Autora. Rozprawę rozpoczyna prezentacja modelu Hubbarda oraz przytoczone jest wyprowadzenie modelu t-J z modelu Hubbarda. W tym samym rozdziale omówione zostały wybrane własności nadprzewodników wysokotemperaturowych, gdzie szczególną uwagę poświęcono stanom elektronowym w płaszczyznach tlenowo miedziowych oraz uporządkowaniu ładunkowemu.

Autor uzasadnia, że oryginalna wersja modelu t-J, która jest wyprowadzona z jednopasmowego modelu Hubbarda, może być zbyt uboga aby opisać fizykę stanów elektronowych w płaszczyznach tlenowo miedziowych. W szczególności, w rozprawie zrezygnowano z całkowitej eliminacji podwójnie obsadzonych stanów oraz uniezależniono wartość całki wymiany J od lokalnego potencjału kulombowskiego U . Otrzymany model t-J-U ma dodatkowy parametr swobodny (U), który decyduje przede wszystkim o ilości podwójnie obsadzonych węzłów. Chociaż takie rozszerzenie modelu t-J ma charakter raczej fenomenologiczny, nie umniejsza to znaczenia uzyskanych wyników choćby z tego powodu, że oryginalną wersję modelu t-J można uzyskać jako formalną granicę modelu t-J-U, gdy U zmierza do nieskończoności. W rozprawie analizowane jest jeszcze jedno, dodatkowe rozszerzenie modelu o wyraz opisujący oddziaływanie typu gęstość-gęstość na sąsiednich węzłach sieci. Jak pokazano w rozprawie, to oddziaływanie ma istotny wpływ na współzawodnictwo pomiędzy nadprzewodnictwem, a uporządkowaniem ładunkowym.

Kolejny rozdział pierwszej części rozprawy poświęcony jest omówieniu przybliżenia Gutzwillera. Szczególną uwagę poświęcono omówieniu sytuacji, gdy symetria translacyjna jest zmodyfikowana na skutek pojawienia się uporządkowania antyferromagnetycznego lub ładunkowego. W tej sytuacji wybór czynników renormalizujących (Gutzwillera) nie jest jednoznaczny. W rozprawie zaprezentowano dwa podejścia, które prowadzą do istotnie różniących się wyników. Oba podejścia można w rozsądny sposób uzasadnić, toteż nie jest dla mnie oczywiste czym należy się kierować przy wyborze jednego z nich. Myślę, że warto poruszyć ten problem w trakcie publicznej obrony. Wytluszczony tekst w końcowym fragmencie podrozdziału 2.2 mylnie sugeruje, że w rozprawie używane jest jedynie jedno (drugie) z tych podejść. Jest to oczywista usterka edytorska.

W dalszej części tego rozdziału omówiona została modyfikacja podejścia Gutzwillera tak, aby wielkości fizyczne wyznaczone z minimum energii swobodnej były równe średnim operatorów,

poprzez, które zostały pierwotnie zdefiniowane. Ta statystyczna konsystentność wymuszona została poprzez wprowadzenie mnożników Lagrange'a do jednocząstkowego, efektywnego Hamiltonianu. Wprowadzenie mnożników Lagrange'a może zwiększyć energię swobodną w stosunku do wartości uzyskanej z procedury minimalizacyjnej, bez nałożonego warunku statystycznej konsystentności.

Przejdę teraz do krótkiego omówienia oryginalnych prac naukowych, stosując numerację przyjętą w rozprawie. Pierwsza z prac dotyczy diagramu fazowego dla modelu t-J-U. Większość (przybliżonych) obliczeń numerycznych przewiduje, że faza antyferromagnetyczna pozostaje stabilna w bardzo szerokim zakresie koncentracji dziur (aż do wartości bliskich 0.2, 0.3), podczas gdy wyniki eksperymentalne wskazują, że dalekozasięgowe uporządkowanie antyferromagnetyczne zanika przy znacznie mniejszym domieszkowaniu. Wyniki przedstawione w rozprawie pokazują, że w ramach statystycznie konsystentnego przybliżenia Gutzwillera, obszar diagramu fazowego zawierający fazę antyferromagnetyczną zostaje drastycznie zredukowany, a czysta faza antyferromagnetyczna występuje jedynie w niedomieszkowanych układach. Jak pokazują wyniki zaprezentowane na drugim rysunku, statystyczna konsystencja ma kluczowe znaczenie dla uzyskania tego wyniku. W ostatnim paragrafie drugiego rozdziału tej pracy Autorzy piszą, że hamiltonian opisywany równaniem (3) jest hamiltonianem jednocząstkowym. Czy jest to w pełni uzasadnione?

Wyniki uzyskane w wyżej omawianej pracy zostały rozszerzone na przypadek hamiltonianu zawierającego przeskok do następnych najbliższych sąsiadów, co zostało zaprezentowane w monoatorskiej publikacji Pana mgra Marcina Abrama, będącej drugą pracą rozprawy. Rozszerzenie takie uważam za bardzo ważne, a uzyskane wyniki za dalece nieintuicyjne. Ponieważ przeskok do następnych najbliższych sąsiadów odbywają się w ramach tej samej podsięci, przeskoki te pozwalają obniżyć energię kinetyczną nośników bez niszczenia matrycy antyferromagnetycznej, w której się poruszają. Można by zatem oczekiwać, że uwzględnienie przeskoków do następnych najbliższych sąsiadów poszerzy obszary diagramu fazowego, w których występuje antyferromagnetyzm. Wyniki zaprezentowane w rozprawie pokazują jednak, że takie rozumowanie jest zbyt uproszczone, gdyż uwzględnienie tych dodatkowych przeskoków ma stosunkowo niewielki wpływ na diagram fazowy.

Ostatnia publikacja dotycząca jednopasmowego modelu t-J jest w rozprawie oznaczona numerem 6. Jest to bardzo ciekawa praca poświęcona falam gęstości ładunku w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych. Zagadnienie to w ostatnich latach cieszyło się szczególnym zainteresowaniem fizyków zajmujących się niekonwencjonalnym nadprzewodnictwem. Autorzy rozszerzyli model t-J-U o międzywęzłowe odpychanie V oraz pokazali, że fale gęstości ładunku pojawiają się dopiero wówczas, gdy oddziaływanie to jest dostatecznie silne. Niestety, w ramach statystycznie konsystentnego przybliżenia Gutzwillera dla tak silnego odpychania międzywęzłowego nie występuje już faza nadprzewodząca. Jak pokazano w pracy, rezultat ten jest

konsekwencją zastosowanego przybliżenia. Aby poprawnie opisać fazę nadprzewodzącą przy tak silnym odpychaniu międzywęzłowym można zastosować rozwinięcie diagramatyczne dla funkcji falowej Gutzwillera. Pokazano również, że bardzo ważne jest odpowiednie dopasowanie wektora modulacji fal gęstości ładunku. Optymalnym rozwiązaniem byłoby wyznaczenie tej wielkości z minimum energii swobodnej, co jednak spowodowałoby konieczność numerycznego badania układów bez symetrii translacyjnej i w praktyce byłoby niesłychanie trudne. W pracy przedstawiony jest przykład diagramu fazowego wyznaczonego z pominięciem nadprzewodnictwa dla wektora uporządkowania fal gęstości ładunku równego $Q=(2\pi/3,0)$.

Publikacje oznaczone numerami trzy, cztery oraz pięć zawierają dogłębną analizę stabilności faz ferromagnetycznych w nadprzewodniku UGe_2 . Stosując statystycznie konsystentne przybliżenie Gutzwillera do periodycznego modelu Andersona uzyskano bardzo dobrą zgodność z wynikami doświadczalnymi. W szczególności poprawnie odtworzono sekwencję oraz charakter przejść fazowych pomiędzy fazami ferromagnetycznymi z silnym (FM2) i słabym (FM1) namagnesowaniem oraz fazą paramagnetyczną. Przejścia te zachodzą pod wpływem pola magnetycznego i ciśnienia oraz zmian temperatury, przy czym założono, że zmiana ciśnienia wpływa przede wszystkim na hybrydyzację pomiędzy stanami elektronów wędrownych i zlokalizowanych orbitali typu f . Podczas gdy w pracy numer trzy przedstawiono najważniejsze wyniki dotyczące diagramu fazowego w zerowej temperaturze, w pracy numer cztery rozważano skończoną temperaturę. Dokładnie przeanalizowano zachowanie krytyczne w trójwymiarowej przestrzeni parametrów (ciśnienie, pole, temperatura) ponownie uzyskując świetną zgodność z wynikami eksperymentalnymi. W pracy przewidziano także obecność nowego kwantowego punktu krytycznego w układzie z nieznacznie zmienioną liczbą nośników. Jest to niezwykle ciekawy wynik wskazujący, że faza nadprzewodząca w UGe_2 występuje w otoczeniu kwantowego punktu krytycznego. Ostatnia z prac poświęconych UGe_2 stanowi cenne uzupełnienie prezentowanych wcześniej wyników. Wcześniej zakładano, że całkowita gęstość ładunku w periodycznym modelu Andersona wynosi $n=1.6$ elektronu/węzeł, a czynnik Landégo dla elektronów f wynosi $g_f=2$, podczas gdy nie ma bezpośrednich wyników eksperymentalnych wskazujących na dokładnie takie wartości obu tych parametrów. W omawianej pracy zbadano modyfikację diagramu fazowego wynikającą ze zmiany tych parametrów. Pokazano, że wyniki ilościowe silnie zależą od koncentracji nośników oraz wartości czynnika Landégo, a najlepszą zbieżność z eksperymentem uzyskano dla tych wartości obu parametrów, które były używane w poprzednich publikacjach.

Rozprawa doktorska kończy się bardzo krótkim posumowaniem. Biorąc pod uwagę świetny i obszerny dorobek naukowy leżący u podstaw tej rozprawy oczekiwałbym znacznie bardziej rozbudowanego podsumowania, lecz jest to jedynie moje subiektywne odczucie.

Praca jest starannie zredagowana. Dostrzegłem jedynie nieliczne problemy techniczne, które nie utrudniają czytania rozprawy, więc nie będę ich wymieniał.

W podsumowaniu stwierdzam, że przedstawiona mi do recenzji rozprawa doktorska Pana mgra Marcina Abrama wnosi istotny wkład w zrozumienie złożonych diagramów fazowych, które są charakterystyczne dla układów nadprzewodzących z silnymi korelacjami elektronowymi. Uważam, że rozprawa spełnia wszystkie zwyczajowe i ustawowe wymagania stawiane pracom doktorskim i wnioskuję do Rady Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego o dopuszczenie mgra Marcina Abrama do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Jednocześnie biorąc pod uwagę ogrom pracy włożony przez doktoranta, oryginalność oraz spójność uzyskanych wyników, a także świetny dorobek naukowy doktoranta wnoszę o wyróżnienie rozprawy.

Miejski

