



Mens agitat 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 Izydor Wysokiński** tel.(081)5376236 e.mail: [karol@tytan.umcs.lublin.pl](mailto:karol@tytan.umcs.lublin.pl)

---

Lublin dn. 27 sierpnia 2013 r.

Opinia o pracy  
doktorskiej pana **mgr inż. Michała Zegrodnika**  
pt. „*Unconventional Superconductivity in Correlated Itinerant Magnetic Systems*”

Opiniowana rozprawa doktorska została wykonana na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH w Krakowie pod kierunkiem prof. dr hab. Józefa Spałka. Praca została napisana w j. angielskim i przygotowana zgodnie z zapisem znowelizowanej Ustawy o stopniach i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, w której w Art. 13.2 czytamy m.in. „*Rozprawa może mieć formę[...], spójnego tematycznie zbioru artykułów opublikowanych lub przyjętych do druku w czasopismach naukowych, określonych przez ministra właściwego do spraw nauki [...]*”. Pan Michał Zagrodnik skorzystał z tej możliwości i przedstawił rozprawę w postaci 7 artykułów naukowych, z których 5 już zostało opublikowanych, a 2 są na etapie recenzji. Jedna praca ukazała się w Phys. Rev. B, druga w New J. Phys., dwie w Acta Physica Polonica A i jedna w materiałach konferencji. Zestaw prac stanowiących rozprawę doktorską został w rozprawie poprzedzony kilkustronicowym wstępem, krótkim omówieniem wszystkich prac oraz podsumowaniem rozprawy. Publikacja konferencyjna jest autorstwa tylko pana Zegrodnika. Pozostałe publikacje są wieloautorskie przy czym w 4 współautorem jest tylko promotor prof. Spałek, a w dwu jeszcze dr hab. J. Bünemann ze Stuttgartu. W sześciu pracach pan Zegrodnik jest pierwszym autorem, co łamie symetrię alfabetyczną a tylko w ostatniej pracy pierwszym autorem jest promotor rozprawy.

Nie mam większych uwag do strony redakcyjnej, może za wyjątkiem tego, że Autor nie wykazał się wielką starannością, gdyż w części wstępnej pracy można znaleźć sporo literówek, a takie błędy są przecież łatwo wychwypane przez współczesne programy edytorskie.

Dla przykładu wymienię tylko (powtarzające się w pracy) na str. 17 słowo „*coexistant*” zamiast „*coexistent*” i z tej samej strony „*approxaimation*” zamiast „*approximation*” itp.

Publikacje wchodzące w zakres rozprawy doktorskiej stanowią zgodnie z wymogami przepisów Ustawy zbiór spójny tematycznie. Wiodącą problematyką rozprawy to analiza właściwości nadprzewodzących i magnetycznych w silnie skorelowanych i wieloorbitalnych modelach, z oddziaływaniami wynikającymi z reguł Hunda. Badane są warunki stabilności fazy nadprzewodzącej w stanie trypletowym i faz magnetycznych (ferro- i antyferromagnetycznych) oraz obszarów współistnienia różnych faz. W szczególności analizowany jest wpływ hybrydyzacji i silnych korelacji elektronowych na badane stany. We wszystkich pracach autorzy ograniczają się do oddziaływań wielociałowych pomiędzy tymi samymi  $U$  i różnymi  $U'$  i  $J$  orbitalami zlokalizowanymi na tych samych węzłach sieci. Długozasięgowe oddziaływania Coulomba są w tej analizie pominięte.

To, że wewnątrz-atomowe oddziaływanie wymienne typu reguły Hunda może prowadzić do niestabilności stanu normalnego metalu i pojawienia się stanu nadprzewodzącego z trypletowym parametrem porządku i parami międzyorbitalnymi, zostało przed laty zaproponowane przez prof. Spałka i badane przez niego i jego młodszych współpracowników. Praca doktorska pana Zegrodnika rozwija tamte idee w kierunku analizy współistnienia nadprzewodnictwa i magnetyzmu oraz silnych korelacji elektronowych.

W pierwszej pracy serii oznaczonej symbolem **A1** z 2012 roku autorzy stosują przybliżenie średniego pola typu Hartree-Focka-Bogoliubova uzyskując bogaty diagram fazowy na płaszczyźnie  $J - n$ , gdzie  $J$  to wartość ferromagnetycznego oddziaływania pomiędzy elektronami na różnych orbitalach ale jednym węźle, a  $n$  to koncentracja elektronów w paśmie. W zależności od hybrydyzacji czyli mieszania stanów z różnych orbitali i różnych węzłów diagram fazowy istotnie się zmienia. O ile bez hybrydyzacji znaczną część diagramu fazowego dla układu ze stałą gęstością stanów wypełnia faza nadprzewodząca, a fazy gdzie nadprzewodnictwo współistnieje z ferromagnetyzmem pojawiają się dla dużych wartości  $J$ , to uwzględnienie hybrydyzacji znacznie zawęża obszar fazy nadprzewodzącej. Pojawia się ona tylko w otoczeniu parametru zapelnienia pasm  $n=2$  przy czym zakres istnienia tej fazy wzrasta ze wzrostem  $J$ . Dla podwyższonych wartości  $J$  pojawiają się różne fazy mieszane. Diagramy fazowe stają się bardziej skomplikowane dla sieci kwadratowej z gęstością stanów posiadającą dla  $n=2$  osobliwość Van Hove'a. Interesujące jest, że dla stałej wartości gęstości stanów i zdegenerowanych pasm pojawienie się fazy nadprzewodzącej wymaga skończonej

wartości parametru  $J$ . Skąd fizycznie bierze się ta różnica w porównaniu z teorią BCS, gdzie dowolnie słabe oddziaływanie przyciągające prowadzi do niestabilności stanu normalnego?

W omawianej pracy **A1** dopuszczono tylko istnienie faz nadprzewodzących trypletowych oraz ferromagnetyzmu, zauważając jednak konieczność rozszerzenia analizy o możliwość wystąpienia uporządkowania antyferromagnetycznego. Kolejna praca cyklu **A2** opisuje wyniki analizy tego samego modelu w przybliżeniu Hartree-Focka-Bogoliubova z uwzględnieniem oprócz faz nadprzewodnika trypletowego także możliwość pojawienia się faz magnetycznych para-, ferro- i antyferromagnetycznej. W tej pracy nie uwzględniono jednak mieszania orbitali oraz skupiono się na analizie temperaturowych zależności szczelin energetycznych nadprzewodnika oraz momentu magnetycznego w fazie mieszanej z antyferromagnetyzmem. Obliczone zależności ciepła właściwego od temperatury wykazują dwie przemiany fazowe; jedną w temperaturze  $T_s$  od fazy mieszanej (nadprzewodnictwo+ferromagnetyzm), a drugą w temperaturze  $T_N$  ze stanu AF do stanu normalnego. Obliczenia wykonane dla sieci kwadratowej pokazują złożony charakter diagramu fazowego już w przybliżeniu średniego pola dla wszystkich oddziaływań.

Pełną analizę uogólnionego modelu z przeskokami na sieci kwadratowej uwzględniającymi procesy hybrydacyjne zaprezentowano w obszernej pracy **A3** opublikowanej w Phys. Rev. B. Przyjęty w tej pracy model dodatkowo uwzględniał kulombowskie oddziaływanie  $U'$  pomiędzy elektronami na tym samym węźle, a w różnych orbitalach. Uwzględnienie tego wyrazu prowadzi do pojawienia się singletowego parametru porządku oraz modyfikacji efektywnego oddziaływania w kanale trypletowym.

Analizując ten model autor założył możliwość pojawienia się fazy ferro- i antyferromagnetycznej. Ta druga wymaga jak wiadomo istnienia dwu podsieci ze spinami do góry na jednej z nich i spinami do dołu na drugiej. Ograniczono się też do stanu jednorodnego ładunkowo, z tą samą średnią gęstością elektronów na obu podsieciach. O ile dobrze rozumiem ten model, to założenie takie nie jest konieczne? W kontekście relacji (26) pomiędzy trypletowymi parametrami porządku w obszarze współistnienia antyferromagnetyzmu i nadprzewodnictwa, gdy odpowiednie parametry porządku na obu podsieciach są różne wydaje się, że dopuszczenie fali gęstości ładunku, a nie tylko fali gęstości spinu może istotnie zmienić uzyskane wyniki. Oczekuję odpowiedzi na to pytanie podczas publicznej obrony.

Zarówno w tej pracy jak i kolejnej **A5** zastosowano przybliżenia typu średniego pola. Ciekawym rezultatem analizy jest spostrzeżenie, że w przybliżeniu Hartree-Focka-Bogoliubova fazy nadprzewodzące (trypletowe) i magnetyczne nawzajem się wzmacniają. Dla poja-

wienia się nadprzewodnictwa trypletowego konieczne jest spełnienie warunku  $U < J$ , który efektywnie upodabnia model do dwuorbitalnego modelu Hubbarda z ujemnym  $U$ . Oznacza to, że odpychanie elektronów na różnych orbitalach musi być mniejsze od całki wymiany.

Ostatnie 3 publikacje rozprawy doktorskiej **A5**, **A6** i **A7** (w tym obszerna praca **A5**, która ukazała się 17 lipca 2013 r. w *New J. Physics*) opisują wyniki uzyskane dla badanego modelu w ramach tzw. statystycznie konsystentnej metody Gutzwillera. Metoda Gutzwillera pozwala na wyjście poza przybliżenie średniego pola w traktowaniu oddziaływań kulombowskich. Statystyczna zgodność zakłada, że znormalizowane pola średnie uzyskane z metody Gutzwillera (np. magnetyzacja, nadprzewodzący parametr porządku, gęstość) są traktowane jako parametry wariacyjne i wyznaczone z warunku minimalizacji energii swobodnej metodą mnożników Lagrange'a. Procedura ta zapewnia maksymalizację entropii układu, ale wymaga rozwiązania w somouzgodniony sposób układu wielu równań. Symetrie występujące w Hamiltonianie redukują problem składający się w ogólności z 256 parametrów i tyluż równań do kilkunastu w zależności od badanej fazy. I tak dla fazy normalnej liczba równań wynosi 8. Dla fazy nadprzewodnika wzrasta do 16, a dla wyznaczenia właściwości fazy ze współistnieniem nadprzewodnictwa i antyferromagnetyzmu wynosi aż 22. Pokazuje to stopień trudności technicznych jakie należy pokonać.

Z zadaniem tym pan Zegrodnik znakomicie się uporał. Wszystkie prace napisane są bardzo przejrzyste i logiczne. Nie mam wątpliwości, że możliwe to było w krótkim czasie realizacji pracy doktorskiej dzięki współpracy z promotorem prof. Spalkiem, który rozwinął szereg metod stosowanych w pracy i także przed laty zaproponował badany w recenzowanej rozprawie model oparty o reguły Hunda do opisu nadprzewodników trypletowych.

Jak widać z tego krótkiego omówienia rozprawa doktorska pana Zegrodnika poświęcona jest systematycznej analizie dwuorbitalnego modelu z oddziaływaniami zlokalizowanymi na węzle (wewnątrzatomowymi). Mimo, że model jest sformułowany ogólnie i pewnie jest zbyt uproszczony, aby opisać realne materiały, w których obserwuje się nadprzewodnictwo trypletowe, to szereg uzyskanych wyników wydaje się być zgodnych z właściwościami znanych nadprzewodników. W szczególności dotyczy to współistnienia nadprzewodnictwa i magnetyzmu, które tu pojawia się w sposób naturalny. Jednym z ważniejszych wyników pracy jest stwierdzenie, że nadprzewodnictwo zaindukowane regułą Hunda pozostaje stabilne nawet w granicy silnych korelacji  $U > 3J$ , gdy efektywne oddziaływanie pozostaje odpychające. Wynik ten wskazuje na konieczność stosowania właściwego opisu silnych korelacji, które w wielu sytuacjach prowadzą do stabilizacji faz ze złamaną symetrią poprzez m.in. indukowanie

długozasięgowych korelacji, co w badanym modelu przejawia się obecnością nielokalnych par w przestrzeni rzeczywistej i symetrią parametru porządku typu  $s^*$ .

W ostatniej pracy cyklu dokonano dodatkowej modyfikacją metody Gutzwiller'a o żądanie zapewnienia zachowania liczby cząstek. W pracy A7 pokazano też, że hybrydyzacja prowadzi do rozszczepienia pasm i wpływa negatywnie na stan nadprzewodzący niszcząc go zupełnie dla hybrydyzacji przekraczającej wartość krytyczną, co może sygnalizować pojawienie się nadprzewodzącej fazy niejednorodnej. W kontekście tych wyników po raz kolejny nasuwa się pytanie o możliwość pojawienia się w układzie fali gęstości ładunku i jej wpływu na stabilność badanych faz? Dotyczy to w szczególności fazy mieszanej nadprzewodnik-antyferromagnetyk. Zaskakujący wydaje się wynik tej pracy przedstawiony na rys. 4 b, e, f. Widmo kwazicząstkowe w stanie nadprzewodzącym wyraźnie nie posiada symetrii cząstka-dziura. Wydaje się, że ten wynik może mieć poważne konsekwencje dla transportowych właściwości układu, ale nie wiem czym jest spowodowany? Najprostsza sugestia jest zawarta w pytaniu: czy potencjał chemiczny został na tym rysunku właściwie zdefiniowany? Chętnie usłyszę opinię na te tematy, tzn. fali gęstości ładunku i braku symetrii cząstka-dziura w widmie kwazicząstek, w trakcie publicznej obrony.

Wspomniałem wcześniej o technicznych trudnościach napotykanym podczas analizy problemu współistniejących faz. Mimo, że model zawiera tylko oddziaływanie jednowęzłowe to jego pełna fizyczna analiza jest złożona. Związanie to jest z dużą liczbą możliwych faz, które model dopuszcza, ich zależnością od parametrów modelu, symetrii sieci krystalicznej i temperatury. Obliczenia analityczne, nawet w przybliżeniu Hartree-Focka są wysoce nietrywialne, wymagają sporej biegłości oraz dobrej znajomości metod fizyki statycznej przemian fazowych. Właściwe potraktowanie korelacji elektronowych jest bardzo trudnym zagadnieniem intensywnie badanym w literaturze przedmiotu przez ostatnie 50 lat (za początek badań układów silnie skorelowanych umownie uznaję 1963 r., a więc rok pojawienia się pierwszej pracy Hubbarda). Pan Zegrodnik opanował i z powodzeniem zastosował technikę Gutzwillera z jej oryginalnym rozwinięciem przez prof. F. Gebharda i współpracowników, uzupełniając ją o żądanie statystycznej konsystencji zaproponowane i rozwijane przez prof. Spalka ze współpracownikami.

Nie mam najmniejszej wątpliwości, że wyniki uzyskane w trakcie realizacji doktoratu istotnie poszerzają naszą wiedzę o układach silnie skorelowanych i jak już wspomniałem stanowią pełną analizę wyjściowego modelu.

**Recenzowana rozprawa spełnia zwyczajowe i ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie pana M. Zegrodnika do dalszych etapów przewodu doktorskiego.** W kontekście przesłanych mi wymagań dotyczących wyróżniania prac, chciałbym dodać, że proponuję wyróżnienie tej pracy, mimo że zwykle wniosek taki stawiam dopiero po publicznej obronie, która jest istotnym elementem całościowej oceny doktoranta. Zakres wykonanych badań, ich złożoność i interpretacje uzyskanych rezultatów w pełni uzasadniają taki wniosek.

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'M. Zegrodnik'.