

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr. inż. Michała Zegrodnika p.t.:

**“Unconventional Superconductivity
in Correlated Itinerant Magnetic Systems”**

Recenzowana rozprawa doktorska poświęcona jest parowaniu trypletowemu indukowanemu regułą Hunda w rozszerzonym dwupasmowym modelu Hubbarda. W szczególności badana w niej jest kwestia stabilności faz nadprzewodzących i ich konkurencji lub współistnienia z fazami z uporządkowaniem magnetycznym. Analizowany jest także wpływ korelacji kulombowskich.

Zgodnie z art. 13 Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki „Rozprawa doktorska może mieć formę [...] spójnego tematycznie zbioru artykułów opublikowanych lub przyjętych do druku w czasopiśmie naukowym [...]”. Taka też jest forma recenzowanej rozprawy. Autor do rozprawy włącza 7 artykułów, ponumerowanych od A.1 do A.7. Jedna z prac opublikowana jest w *New Journal of Physics*, jedna w *Physical Review B*, dwie w *Acta Physica Polonica A* oraz jedna w materiałach konferencyjnych. Jedna praca została zaakceptowana do druku w *Journal of Physics: Condensed Matter*. Kolejna została dopiero wysłana do *Physical Review Letters*, ale nawet jeśli weźmie się pod uwagę jedynie materiał zaprezentowany w publikacjach już opublikowanych i przyjętej do druku, to jest on w zupełności wystarczający na rozprawę doktorską.

Wszystkie składające się na rozprawę publikacje dotyczą tego samego obszaru badawczego tworząc ciekawy monotematyczny cykl poświęcony różnym aspektom parowania trypletowego. W poszczególnych pracach dwupasmowy model Hubbarda

z ferromagnetycznym oddziaływaniem wymiennym wynikającym z reguły Hunda badany jest z wykorzystaniem różnych metod obliczeniowych. Obejmują one zarówno proste przybliżenie Hartree'ego-Focka (HF), jak i niedawno opracowane statystycznie spójne przybliżenie Gutzwillera (ang. *Statistically Consistent Gutzwiller Approximation* – SGA). To ostatnie pozwoliło na zbadania roli korelacji kulombowskich, zwłaszcza ich wpływu na stabilność występujących w modelu faz. Jedną z publikacji jest monoautorska, w pozostałych współautorem jest promotor, prof. Józef Spałek oraz w przypadku dwóch publikacji dodatkowo dr hab. Jörg Bünemann. Zgodnie z oświadczeniami współautorów udział mgr. Michała Zegrodnika w powstaniu wszystkich wchodzących w skład rozprawy publikacji jest znaczący, przy czym obliczenia - zarówno analityczne, jak i numeryczne - zostały wykonane przez niego samodzielnie. Występuje on też jako pierwszy autor w prawie wszystkich składających się na rozprawę publikacjach.

Publikacje te opatrzone są napisanym w języku angielskim krótkim wprowadzeniem w problematykę nadprzewodnictwa trypletowego oraz metod obliczeniowych używanych przy badaniu układów ze skorelowanymi elektronami. Dołączone są także krótkie opisy tworzących rozprawę publikacji, rozdział zawierający podsumowanie oraz bibliografia z 95 pozycjami.

Cykl publikacji rozpoczyna praca A.1 „*Spin-triplet pairing induced by Hund's rule exchange in orbitally degenerate systems: Hartree-Fock approximation*” opublikowana w *Acta Physica Polonica A*. Badany tam model opisuje przeskok elektronów pomiędzy tymi samymi orbitalami na sąsiednich węzłach, międzypasmową hybrydyzację, odpychanie kulombowskie elektronów na tych samych orbitalach i węzłach oraz ferromagnetyczne oddziaływanie indukowane regułą Hunda. Model rozwiązywany jest w ramach przybliżenia średniego pola z uwzględnieniem nadprzewodzących faz typu A, A1 i B oraz stanu ferromagnetycznego (FM). Otrzymano diagram fazowy oraz temperaturowe zależności wielkości takich jak szczelina nadprzewodząca czy moment magnetyczny. W szczególności pokazano możliwość współistnienia nadprzewodnictwa i ferromagnetyzmu oraz zbadano wpływ hybrydyzacji, która – jak się okazało - działa destrukcyjnie na stan nadprzewodzący, natomiast wspomaga uporządkowanie

ferromagnetyczne. W następnej pracy (A.2) „*Coexistence of spin-triplet superconductivity with antiferromagnetism in orbitally degenerate system: Hartree-Fock approximation*”, także opublikowanej w *Acta Physica Polonica A* autorzy rozszerzają badania o możliwość występowania uporządkowania antyferromagnetycznego (AF). Używany jest nieco prostszy model, różniący się od badanego w pracy A.1 brakiem hybrydyzacji, a obliczenia wykonywane są także w ramach przybliżenia Hartree'ego-Focka. Najciekawszym wynikiem jest pojawienie się na diagramach fazowych obszaru, w którym trypletowe parowanie współistnieje z uporządkowaniem antyferromagnetycznym. Badanie modelu uzupełnionego o hybrydyzację, przy dopuszczeniu uporządkowań zarówno ferro- jak i antyferromagnetycznych jest tematem obszernej pracy A.3 „*Coexistence of spin-triplet superconductivity with magnetic ordering in an orbitally degenerate system: Hartree-Fock-BCS approximation revisited*” opublikowanej w *Physical Review B*. Prócz uwzględnienia hybrydyzacji w pracy szczegółowo przebadana jest stabilność poszczególnych faz w zależności od stopnia wypełnienia pasm. Wyniki wskazują, że wzrost hybrydyzacji prowadzi do obniżenia temperatury przejścia ze stanu w którym parowanie współistnieje z uporządkowaniem magnetycznym do czystego stanu magnetycznego (AF lub FM), a jednocześnie do podwyższenia temperatury przejścia ze stanów magnetycznych do stanu paramagnetycznego (dla stanu FM zostało to już pokazane w pracy A.1). Jednym z bardzo ciekawych wyników jest też obserwacja, że przy współistnieniu parowań i ferromagnetyzmu jedynie elektrony ze spinem większościowym tworzą pary Coopera. Innym ciekawym wynikiem jest swego rodzaju współzależność zmian magnetyzacji i szczeliny nadprzewodzącej, mogąca sugerować wzajemne wzmacnianie się porządku ferromagnetycznego i nadprzewodnictwa trypletowego. W przypadku parowania singletowego pewne eksperymenty sugerują podobne współdziałanie niewspółmiernych fal spinowych i nadprzewodnictwa typu FFLO [M. Kenzelmann et al., *Science* **321**, 1652 (2008)]. Praca A.3 zasługuje na uwagę także z powodu jej do pewnego stopnia „pedagogicznego” charakteru, tzn. prowadzone obliczenia są bardzo precyzyjnie opisane, a bogata dyskusja wyników ułatwia zrozumienie fizycznego znaczenia otrzymanych wyników. Praca A.4, „*Hund's rule induced spin-triplet superconductivity coexisting with magnetic ordering in the degenerate band Hubbard model*” opublikowana w *Proceedings of the ISD Workshops*, jak sam doktorant stwierdza, nie

wprowadza nowych modeli ani metod, a jest jedynie rozszerzeniem zakresu wyników prezentowanych we wcześniejszych publikacjach.

W kolejnych pracach, poczynając od opublikowanej w *New Journal of Physics* pracy A.5 „*Coexistence of spin-triplet superconductivity with magnetism within a single mechanism for orbitally degenerate correlated electrons: statistically consistent Gutzwiller approximation*”, dwupasmowy model Hubbarda z indukowanym regułą Hunda parowaniem trypletowym analizowany jest poza przybliżeniem Hartree'ego-Focka. Badany jest ten sam model co np. w pracy A.3, ale obliczenia prowadzone są w ramach statystycznie spójnego przybliżenia Gutzwillera (SGA). Jest to metoda, w której dla zapewnienia zgodności średnich wielkości fizycznych wyznaczonych metodami wariacyjnymi oraz z warunków samozgodności narzuca się dodatkowe warunki wyrażone poprzez mnożniki Lagrange'a. Zważywszy na fakt, że w modelu są dwa pasma oraz duża liczba uwzględnionych faz, przeprowadzenie obliczeń pozwalających wyliczyć wartości średnich pól, czynników zwężenia pasma czy mnożników Lagrange'a było nie lada wyzwaniem. Dotyczy to zarówno obliczeń analitycznych przy wyprowadzaniu odpowiednich równań, jak i numerycznych przy ich rozwiązywaniu. Ponieważ metoda SGA wychodzi znacznie poza przybliżenie Hartree'ego-Focka przy opisie wpływu korelacji kulombowskich, porównanie wyników otrzymanych w pracy A.5 z wcześniejszymi otrzymanymi prostymi metodami średniego pola pozwoliło na dyskusję wpływu korelacji na charakter rozwiązań, a w szczególności na stabilność poszczególnych faz. Co ciekawe, w ramach SGA, w przeciwieństwie do przybliżenia Hartree'ego-Focka, dla realistycznych parametrów nie otrzymano rozwiązań w których nadprzewodnictwo typu A1 współistnieje z ferromagnetyzmem. Niemniej jednak w wielu innych przypadkach różnice są tylko ilościowe i zgodnie z oczekiwaniem znikają w granicy słabego sprzężenia.

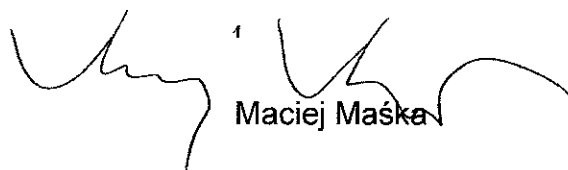
We wszystkich wcześniejszych pracach pojawienie się parowania trypletowego pomiędzy elektronami na różnych orbitalach tego samego węzła było efektem przewagi sprzężenia J wynikającego z reguły Hunda nad międzyorbitalowym odpychaniem kulombowskim U' . W pracy A.6 „*Even-parity spin-triplet pairing for orbitally degenerate correlated electrons by purely repulsive interactions*”, wysłanej do *Physical Review*

Letters, metoda SGA wykorzystana została żeby zademonstrować, że parowanie takie może pojawić się także w reżimie, w którym dominuje kulombowskie odpychanie. Co więcej, mimo, iż Hamiltonian zawiera jedynie wyraz opisujący oddziaływanie parujące na węźle, nadprzewodzący parametr porządku zawiera domieszkę parowania także międzywęzłowego, co przypisać można jedynie efektom czysto korelacyjnym. Podobne podejście, tj. metoda SGA w obszarze dominacji korelacji kulombowskich nad oddziaływaniem wynikającym z reguły Hunda, zastosowane zostało w ostatniej z prac, pracy A.7 „*Spin-triplet paired state induced by the Hund's rule coupling and correlations: fully statistically consistent Gutzwiller approach*”, zaakceptowanej do druku w *Journal of Physics: Condensed Matter*. Tutaj jednak nacisk został położony na problem zachowania liczby cząstek w obliczeniach w ramach SGA, warunek który powinien być spełniony w przypadku cieczy Fermiego. W tym celu do efektywnego Hamiltonianu wprowadzony został wyraz z kolejnym mnożnikiem Lagrange'a, zamiast wprowadzania używanych czasami w podejściu Gutzwillera *fugacity factors*. Dobór odpowiedniej wartości mnożnika zapewnia, że średnia liczba cząstek nie ulegnie zmianie podczas rzutowania wielocząstkowej funkcji falowej. Przeprowadzone obliczenia pokazały, że narzucenie warunku zachowania średniej liczby cząstek w przypadku silnego parowania prowadzi do zmniejszenia wartości szczeliny nadprzewodzącej.

Przechodząc do ogólniejszej oceny recenzowanej rozprawy mogę z pełnym przekonaniem stwierdzić, że zawiera ona dużą ilość ważnych i oryginalnych wyników. Przy użytej formie, tj. cyklu artykułów – zwłaszcza w sytuacji, gdy tylko jeden z nich jest monoautorski, ważną rolę odgrywają oświadczenia współautorów. W przypadku Pana mgr. inż. Michała Zegrodnika wskazują one jednoznacznie, że to on jest autorem obliczeń, zarówno analitycznych jak i numerycznych, których wyniki prezentowane są w publikacjach. Można więc stwierdzić, biorąc pod uwagę zarówno ilość, jak i wagę zaprezentowanych w recenzowanym cyklu publikacji wyników, że wniósł on znaczący wkład w zrozumienie wielu aspektów związanych z indukowanym regułą Hunda parowaniem trypletowym w rozszerzonym dwupasmowym modelu Hubbarda. Można też stwierdzić, że wykazał się on dobrą znajomością w zakresie fizyki teoretycznej ciała stałego, bardzo dobrze opanował aparat matematyczny niezbędny do prowadzenia

badań w tym obszarze, oraz biegle posługuje się zaawansowanymi metodami numerycznymi.

W związku z powyższym stwierdzam, że rozprawa w pełni spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim w *Ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym* [..], jednocześnie wnosząc o dopuszczenie Pana mgr. inż. Michała Zegrodnika do dalszych etapów przewodu doktorskiego.


Maciej Maśka