

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

AGH

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

KATEDRA FIZYKI MATERII SKONDENSOWANEJ

Kraków, dn. 31.10.2019

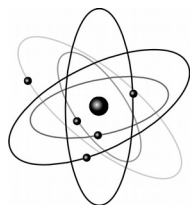
dr hab. inż. Bartłomiej Wiendlocha, prof. AGH
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademii Górniczo-Hutniczej im. St. Staszica w Krakowie

Recenzja rozprawy habilitacyjnej pt. "Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe oraz inne stany o złamanej symetrii w układach silnie skorelowanych elektronów" dr inż. Michała Zegrodnika.

Pan dr Michał Zegrodnik ukończył studia magisterskie w 2008. roku na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej im. St. Staszica w Krakowie, uzyskując tytuł zawodowy magistra inżyniera fizyki technicznej. W tej samej jednostce w roku 2013. uzyskał stopień naukowy doktora nauk fizycznych, za wyróżnioną pracę doktorską pt. "Nadprzewodnictwo niekonwencjonalne w skorelowanych ferromagnetykach pasmowych", wykonaną pod kierunkiem prof. dr hab. Józefa Spałka. Po doktoracie został zatrudniony jako asystent, a następnie adiunkt w Akademickim Centrum Materiałów i Nanotechnologii AGH, gdzie pracuje obecnie.

Zainteresowania naukowe dr Zegrodnika koncentrują się wokół teoretycznego opisu struktury elektronowej i wynikających z niej własności materiałów krystalicznych, w których występują silne oddziaływania pomiędzy elektronami (tzw. układy silnie skorelowane). W szczególności jego badania skupiają się nad nadprzewodnikami wysokotemperaturowymi, dla których, jak wiadomo, występuje niefononowy mechanizm nadprzewodnictwa i nie została jeszcze sformułowana ogólna teoria nadprzewodnictwa. Od pewnego czasu dr Zegrodnik interesuje się również własnościami układów nanoskopowych. Jako osiągnięcie naukowe, będące podstawą postępowania habilitacyjnego, dr Zegrodnik wskazał cykl dziewięciu publikacji

Akademia Górniczo-Hutnicza | Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Katedra Fizyki Materii Skondensowanej
al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków,
tel. +48 12 617 29 53, fax +48 12 634 00 10
e-mail: sekretariat@fis.agh.edu.pl , www.fis.agh.edu.pl/



powiązanych tematycznie, zatytułowany jako "Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe oraz inne stany o złamanej symetrii w układach silnie skorelowanych elektronów". Wszystkie prace zostały napisane wspólnie z prof. Józefem Spałkiem, dodatkowo w trzech pracach współautorami są inni członkowie zespołu prof. Spałka: Jan Kaczmarczyk, Marcin Abram, Andrzej Biborski i Maciej Fidrysiak. Sześć prac opublikowano w *Physical Review B*, a po jednej w *New Journal of Physics*, *Journal of Physics: Condensed Matter* oraz *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, czyli międzynarodowych czasopismach o bardzo wysokiej renomie. W siedmiu z prac Habilitant jest pierwszym autorem.

Przedstawiony cykl publikacji stanowi bardzo dobrze przemyślany, logiczny i konsekwentnie realizowany plan badawczy, za którego dalekosiężny cel można uznać dążenie do stworzenia ilościowej teorii nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego, występującego w związkach zawierających płaszczyzny miedziowo-tlenowe (tzw. kupraty) i opartego na mechanizmie silnych oddziaływań elektronowych. Jest to rzecz jasna zagadnienie niezwykle ciekawe, o fundamentalnym znaczeniu dla fizyki materii skondensowanej, jednocześnie bardzo ambitne i wymagające. W Autoreferacie dr Zegrodnik podzielił przedstawiony cykl prac na pięć części, które skrótowo omówię poniżej.

Część pierwsza, na którą składają się prace H1 i H2 [PRB 95, 024506 (2017) i PRB 96, 054511 (2017)] dotyczy wyboru optymalnego modelu jednopasmowego dla płaszczyzny Cu-O, który pozwoliłby na opisanie podstawowych własności fazy nadprzewodzącej w kupratkach. Punktem startowym do rozważań był opis układu w ramach efektywnego hamiltonianu, uwzględniającego energię kinetyczną przeskoku elektronów pomiędzy węzłami sieci, silne odpychanie Kulombowskie na węzle oraz oddziaływanie wymienne (tzw. model t-J-U). Model ten może być zredukowany do modelu Hubbarda lub t-J. Autor prowadził obliczenia w oparciu o diagramatyczne rozwinięcie funkcji falowej Gutzwillera (DE-GWF) oraz jako przypadek graniczny w oparciu o metodę zrenormalizowanego pola średniego (RMFT). Obliczenia prowadzono w funkcji wartości podstawowych parametrów hamiltonianu, tj. t , J , U , niemniej pozostających w okolicach wartości postulowanych w literaturze. Obliczenia pokazały, że najlepsze rezultaty daje najogólniejszy model t-J-U, dla którego uzyskano diagramy fazowe, pozostające w dość dobrej zgodności z obserwacjami eksperymentalnymi. W szczególności uzyskano charakterystyczną strukturę "kopuły" nadprzewodzącej w diagramie fazowym w funkcji domieszkowania, jego

asymetrię dla domieszek dziurowych i elektronowych, przejście pomiędzy fazami typu BCS i nie-BCS (ze względu na wkład energii kinetycznej do energii kondensacji) oraz ilościową zgodność z wartościami prędkości Fermiego. W szczególności należy tu podkreślić, że zgodność prezentowanej teorii z eksperymentem jest już nie tylko na poziomie jakościowym, ale również ilościowym, co świadczy o sukcesie zastosowanych metod. Publikacje H1 i H2 są obecnie cytowane w sumie 28 razy.

W kolejnym etapie badań [praca H3 PRB 95, 024507 (2017)] zastosowano wcześniej wybrany model t-J-U do zbadania wpływu efektów międzypłaszczyznowych, w sposób naturalny rozszerzając obszar badań etapu pierwszego. W hamiltonianie efektywnym uwzględniono dodatkowo przeskok elektronów pomiędzy płaszczyznami Cu-O, międzypłaszczyznowe oddziaływanie wymiany oraz przeskok par elektronów. Jakościowo, uzyskane wyniki były podobne do tych dla modelu jednopłaszczyznowego. Nowym wynikiem było stwierdzenie, że w układach wielowarstwowych za wzrost temperatury krytycznej powinny odpowiadać międzypłaszczyznowe przeskoki par. Wyniki teoretyczne zostały z sukcesem porównane z eksperymentalnymi dla dwupłaszczyznowego układu Bi-2212. Praca H3 ma obecnie 12 cytowań.

Trzeci etap badań, opublikowany w pracach H4-H6 [NJP 20, 063015 (2018), JPCM 29, 365602 (2017), PRB 98, 155144 (2018)], dotyczył analizy innych stanów o złamanej symetrii, pojawiających się na diagramie fazowym kupratów, oraz ich współistnienia z nadprzewodnictwem. Były to faza nematyczna, faza z falą gęstości ładunku (CDW), faza z gęstością par Coopera (PDW). Z ciekawych jakościowo wyników stwierdzono, że fazy nematyczna i nadprzewodząca mogą współistnieć pomimo konkurencji. Stabilizacja fazy CDW możliwa była w rozszerzonym modelu t-J-U-V, czyli z międzywęzłowym odpychaniem Kulombowskim. Przy poprowadzeniu obliczeń do odpowiednio wysokiego rzędu rozwinięcia DE-GWF udało się odtworzyć właściwą sekwencję faz na diagramie w funkcji domieszkania. Prace obecnie cytowane 12 razy.

W czwartym etapie badań [praca H7, PRB 104511 (2019)] dokonano kolejnego uogólnienia poprzednich prac, tym razem włączając do hamiltonianu efektywnego orbitale tlenowe, co daje w efekcie model trójpasmowy, zawierający orbitale *d* miedzi oraz *p* tlenu. Zasadniczo, w kontekście nadprzewodnictwa wyniki z modelu trójpasmowego pokrywają się z modelem jednopasmowym ze względu na największy wkład do parowania "dd" orbitali miedzi. Zatem rozszerzenie analizy na

model trójpasmowy pozwala uwiarygodnić wcześniejsze rezultaty, uzyskane dla modelu jednopasmowego. Co więcej, dodatkowo otwiera pole do dalszych prac, mających na celu wyjaśnienie obserwowanych różnic we własnościach poszczególnych związków z rodziny kupratów, różniących się m.in. koncentracją dziur na orbitalach tlenowych. Praca opublikowana w roku bieżącym, nie ma jeszcze zarejestrowanych cytowań.

Ostatnia część serii prac [H8 i H9, PRB 90, 174507 (2014) i J. Supercond. Nov. Magn. 28, 1155 (2015)] odbiega nieco od tematyki H1-H7, ponieważ dotyczy nadprzewodników na bazie żelaza, które nie są *de facto* układami silnie skorelowanymi. Chronologicznie ujmując, prace te powstały przed pracami H1-H7 w czasie, gdy habilitant interesował się powstawaniem fazy FFLO w nadprzewodnikach. Niemniej od strony badanych zjawisk fizycznych (niekonwencjonalne nadprzewodnictwo i stany o złamanej symetrii) jak i stosowanego podejścia (rozwiązania w oparciu o mikroskopowy hamiltonian efektywny) prace te wpisują się w tematykę osiągnięcia naukowego. Nowym pomysłem, analizowanym w H8 i H9, była możliwość spontanicznego powstawania fazy FFLO, w której pary Coopera mają niezerowy pęd środka masy, bez konieczności przykładania zewnętrznego pola magnetycznego. Powodem powstawania tej fazy w żelazowcach miałyby być dominujące parowanie międzypasmowe - ponieważ płaty powierzchni Fermiego dla różnych pasm są rozsunięte, to aby para Coopera powstała, jeden z elektronów musi mieć przesunięty wektor falowy względem drugiego. W H8 analizowano możliwość powstania par singletowych, a w H9 trypletowych. Rezultatem obliczeń było stwierdzenie możliwości powstania fazy FFLO w badanym modelu, który powinien być bliski realizacji w nadprzewodniku $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$. Hipoteza ta, jak dotąd nie została potwierdzona doświadczalnie. Prace cytowane 6 razy.

Zgodnie z oświadczeniem Habilitanta miał on dominujący wkład do prac H1-H4 oraz H6-H9 (liczbowo oszacowany przez niego w granicach 65% - 80%) oraz znaczący (25%) wkład do pracy H5. W szczególności, zaimplementował on odpowiednie programy numeryczne, wykonał obliczenia oraz analizował uzyskane wyniki. Jest to zgodne również z oświadczeniami współautorów. Profesor Spałek w swoim oświadczeniu podkreślił, że zasługą Habilitanta jest zasadnicze rozwinięcie używanej w pracach metody DE-GWF oraz zwrócił uwagę na jego praktycznie samodzielne zastosowanie tej metody do obliczeń w kolejnych pracach. Ponieważ w większości

publikacje są dwu-autorskie, nie pozostawia to żadnych wątpliwości co do decydującej roli, jaką dr Zegrodnik odegrał w ich przygotowaniu i opublikowaniu.

Wszystko to daje jednoznacznie pozytywną ocenę osiągnięcia naukowego Habilitanta.

Ocena pozostałego dorobku naukowego oraz działalności dydaktycznej i organizacyjnej

Poza pracami H1-H9 dr Zegrodnik był współautorem 16 publikacji, które ukazały się w dobrych i bardzo dobrych czasopismach naukowych. Tematyka tych prac dotyczy głównie niekonwencjonalnego nadprzewodnictwa w układach krystalicznych, gdzie przedmiotem badań było m.in. współistnienie nadprzewodnictwa z magnetyzmem oraz nadprzewodnictwo w nanostrukturach (przede wszystkim w serii prac napisanych we współpracy z dr Pawłem Wójcikiem). Prace te z powodzeniem dopełniają osiągnięcie habilitacyjne.

Publikacje dr Zegrodnika, jak podaje w Autoreferacie, były cytowane 146 razy, indeks Hirscha $H = 7$. Na dzień przygotowania niniejszej recenzji wskaźniki te wzrosły do 176 cytowań i $H = 8$. Nie są to wartości wysokie, natomiast biorąc pod uwagę wysoce specjalistyczną tematykę prac, stosunkowo nieduży okres od obrony doktoratu, oraz widoczny wzrost w cytowalności prac Habilitanta w ostatnim czasie, można sądzić, że jego prace wkrótce osiągną, adekwatną do ich wysokiego poziomu, rozpoznawalność w środowisku fizyków ciała stałego.

Aktywność Habilitanta na polu konferencyjnym jest raczej umiarkowana, wygłosił 9 referatów, w tym 2 na konferencjach zagranicznych, oraz przedstawił 8 plakatów. Trzy razy wszedł w skład komitetów organizacyjnych konferencji naukowych. Był promotorem pomocniczym jednej pracy doktorskiej. Niestety nie odbył dłuższych, zagranicznych staży naukowych, co pomogłoby mu nawiązać kontakty z innymi grupami badawczymi, być może również eksperymentalnymi, czego obecnie niestety trochę brakuje.

Większą aktywność dr Zegrodnik wykazuje w obszarze zaangażowania w projekty naukowe. Obecnie kieruje projektem "Sonata", finansowanym przez Narodowe Centrum Nauki, był też wykonawcą w kilku innych projektach. Pokazuje to, że ma już

odpowiednie doświadczenie i jest zdolny do samodzielnego pozyskiwania środków na badania naukowe.

Ze względu na stanowisko i miejsce pracy Habilitant nie prowadzi zajęć dydaktycznych, mimo tego przygotował, wraz ze współpracownikiem, autorski przedmiot obieralny "Computational methods for nanosystems and correlated electron systems", co należy docenić.

Za swoje osiągnięcia naukowe był trzykrotnie nagradzany nagrodą Rektora AGH za osiągnięcia naukowe.

Podsumowując stwierdzam, że przedstawione mi do oceny osiągnięcie naukowe oraz pozostały dorobek naukowy i działalność dr Michała Zegrodnika bez wątpienia spełniają ustawowe i zwyczajowe wymogi stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego. Prace, przedstawione jako osiągnięcie habilitacyjne, bez wątpienia wnoszą istotny wkład w zrozumienie fizyki układów silnie skorelowanych, w szczególności nadprzewodników wysokotemperaturowych na bazie miedzi, co potwierdza godna podkreślenia ilościowa zgodność przewidywań teorii z eksperymentem. Dr Zegrodnik z powodzeniem zdobywa i realizuje granty naukowe, publikuje w renomowanych czasopismach naukowych, ma już doświadczenie w pracy z doktorantami, zatem jest gotowy do prowadzenia samodzielnej działalności naukowej. Bez zastrzeżeń popieram wniosek o nadanie mu stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk fizycznych.

