



**Ocena rozprawy habilitacyjnej dra Michała Zegrodnika p.t.
"Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe oraz inne stany o
złamanej symetrii w układach silnie skorelowanych elektronów"**

i

Jego dorobku naukowego.

Dr inż. Michał Zegrodnik ukończył studia magisterskie z fizyki technicznej na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej w Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie w 2008r.

Stopień naukowy doktora nauk fizycznych otrzymał w 2013r. na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej w Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie na podstawie rozprawy p.t.

„Nadprzewodnictwo niekonwencjonalne w skorelowanych ferromagnetykach pasmowych”. Promotorem był prof. dr hab. Józef Spałek z Uniwersytetu Jagiellońskiego. Obrona i rozprawa zostały wyróżnione przez Radę Wydziału Fizyki Technicznej. Obecnie, dr M. Zegrodnik pracuje na stanowisku adiunkta w Akademickim Centrum Materiałów i Nanotechnologii Akademii Górniczo-Hutniczej.

Specjalizacją naukową dra M. Zegrodnika jest fizyka teoretyczna ciała stałego, a przede wszystkim teoria nadprzewodnictwa i układy silnie skorelowanych elektronów. Całkowity dorobek naukowy dra M. Zegrodnika obejmuje 26 prac opublikowanych w czasopiśmie międzynarodowych znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (JRC), i 1 pracę poza bazą JRC z Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH.

Po doktoracie opublikował 20 prac w większości w bardzo dobrych czasopiśmie międzynarodowych, a wyniki badań przedstawiał na wielu konferencjach międzynarodowych w kraju i za granicą, m.in. osobiście uczestniczył w 17 konferencjach przedstawiając referaty ustne (9) i plakaty. Swoje prace opublikował m.in. w prestiżowym New Journal of Physics - 3, Physical Review B-10, Journal of Physics:Condensed Matter-4, Acta Physica Polonica A -2, Physica Status Solidi (b)-2; Physica E-2, Philosophical Magazine-1, Journal of Superconductivity&Novel Magnetism-1, Journal of Physics B-1. Dr M. Zegrodnik jest aktywnym młodym naukowcem z dużym już i poważnym dorobkiem naukowym.

Jako dysertację habilitacyjną dr M. Zegrodnik przedstawia cykl 9 publikacji powiązanych tematycznie [A1-A9] zatytułowany: "Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe oraz inne stany o złamanej symetrii w układach silnie skorelowanych elektronów", ponadto 42 stronicowy Autoreferat w języku polskim (i w j. angielskim) przedstawiający opis osiągnięć naukowych i dorobku.

Cykl prac stanowiących osiągnięcie naukowe opublikowano w bardzo dobrych czasopiśmie: 6 prac [H1,H2,H3,H6,H7,H8] w Physical Review B, praca [H4] w New Journal of Physics, praca [H5] w Journal of Physics:Condensed Matter i 1 praca [H9] w J. Superconductivity & Novel Magnetism. Wszystkie prace są współautorskie, w 9 pracach współautorem jest prof. Józef Spałek Pozostali współautorzy to w pracy [H1]-dr J. Kaczmarczyk i w pracy [H5]-dr M. Abram i [H7] – A. Biborski i J. Fidrysiak.

ul. Umultowska 85, 61-614 Poznań, Poland
tel. +48 61 829 51 50, fax +48 61 829 52 02
dziekfiz@amu.edu.pl

Załączono oświadczenia wszystkich współautorów, jak również oświadczenia Habilitanta określające wkład w powstanie prac zbiorowych stanowiących podstawę habilitacji. Habilitant podaje procentowy wkład własny do publikacji, poza pracą [H5]-(wkład 25%); w pozostałych publikacjach wkład ten określono na 70%-80%, i w [H1] na 65%.

Tematyka rozprawy habilitacyjnej obejmuje układy nadprzewodzące o wysokiej temperaturze krytycznej, głównie nadprzewodniki miedziowo-tlenowe. Oczywiście są to wiodące zagadnienia fizyki fazy skondensowanej. Podstawą są obliczenia oparte na podejściu wariacyjnym Gutzwillera dla kilku modeli silnie skorelowanych elektronów: modelu t-J, modelu t-J-U i różnych jego rozszerzeń oraz tójpasmowego modelu d-p płaszczyzn Cu-O [H1-H7]. Dwie prace [H8, H9] dotyczą możliwości parowania o niezerowym pędzie, fazy Fulde-Ferrela-Larkina-Ovchinnikova (FFLO) i ewentualnego zastosowania do nadprzewodników żelazowych.

Autor skupia się na problemie silnych korelacji elektronowych i możliwie poprawnego ich uwzględnienia oraz na anizotropowym nadprzewodnictwie, głównie o symetrii typu d-wave. Zastosował metodę diagramowego rozwinięcia funkcji falowej Gutzwillera (DE-GWF), którą rozszerzył na przypadek kilku modeli elektronowych oraz na zbadanie innych faz z porządkiem diagonalnym, oprócz singletowego nadprzewodnictwa [H1-H7]. Metoda DE-GWF pozwala w sposób systematyczny na wyjście poza znaną metodę zrenormalizowanego pola średniego (RMFT), wprowadzoną przez grupę fizyków z ETH-Zürich (F. C. Zhang, C. Gros, T. M. Rice and H. Shiba) w latach 1987-1988, w związku z hipotezą rezonujących wiązań walencyjnych (RVB) P.W. Andersona, jako mechanizmu nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego w miedzianach. Metoda RMFT lub metoda oparta na przybliżeniu Gutzwillera jest ścisła tylko w granicy $d=\infty$. Metoda DE-GWF natomiast uwzględnia nielokalne korelacje o zwiększonym zasięgu, a w zerowym rzędzie jest równoważna z RMFT. Prowadzi ona do rezultatów, które są równoważne tym w podejściu wariacyjnego Monte-Carlo (VMC) zastosowanego do pełnej funkcji Gutzwillera.

Metoda DE-GWF została zaproponowana przez J. Bünemanna, T. Schicklinga i F. Gebharda (2012) dla stanu paramagnetycznego w modelu Hubbarda, a później rozwinięta i zastosowana do opisu stanu nadprzewodzącego w tym modelu w pracach J. Kaczmarczyka, J. Spałka, T. Schicklinga i J. Bünemanna (2013).

W metodzie DE-GWF procedura minimalizacyjna prowadzi do efektywnego Hamiltonianu jednocząstkowego z efektywnym przeskokiem (t_{ij}^{eff}) zawierającym także wkład od parowania nadprzewodzącego (Δ_{ij}^{eff}). Pozwala to wyznaczyć energię kwazicząstek ($\epsilon^{eff}(\mathbf{k})$) oraz funkcję szczelinową ($\Delta^{eff}(\mathbf{k})$), a także skorelowaną przerwę nadprzewodzącą $\Delta_G = \langle c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}^{\dagger} \rangle_G$.

Jak pokazano w szeregu prac grupy prof. J. Spałka i Habilitanta metodę DE-GWF można zastosować do opisu nadprzewodnictwa i uporządkowań elektronowych w kilku modelach silnie skorelowanych elektronów i jest ona wydajna numerycznie. Oczywiście podejście wariacyjne oparte na funkcji falowej Gutzwillera dotyczy obliczeń stanu podstawowego i bezpośrednio nie opisuje własności temperaturowych nadprzewodników.

W pracach [H1,H2] (PRB-2017) zbadano, w ramach metody DE-GWF, modele jednopasmowe: model Hubbarda, model t-J oraz model t-J-U, na sieci kwadratowej. Te modele elektronowe są powszechnie stosowane do opisu płaszczyzn Cu-O wysokotemperaturowych nadprzewodników miedziowych.

Model t-J-U (lub t-t'-J-U) wychodzi poza zwykły paradygmat opisu silnych korelacji. Takie modele stosowano wcześniej w związku z nadprzewodnictwem anizotropowym w miedzianach, lecz głównie w zakresie słabych lub umiarkowanych korelacji. R. B. Laughlin (2002) zaproponował model t-J-U w kontekście tzw. gossamer superconductivity i

zastosowanie metody Gutzwillera. Kilku autorów (np. F. C. Zhang-2003) podjęło ten kierunek badań. Model t-J-U zawiera przypadki standardowego modelu Hubbarda ($J=0$) i modelu t-J ($U=\infty$). W porównaniu z konwencjonalnym modelem t-J, w modelu t-J-U dopuszcza się skończoną liczbę podwójnych obsadzeń danego węzła (czyli więcej fluktuacji ładunkowych).

Prace Habilitanta badają powyższe modele głównie w zakresie silnego U. Zasadnicze wyniki ilustruje Rysunek 3 Autoreferatu wzięty z pracy [H1]. W płaszczyźnie doping (δ) – odpychanie kulombowskie (U) w modelu Hubbarda otrzymano nadprzewodnictwo o symetrii typu d-wave, ale dla U przekraczających 4 w jednostkach $|t|$. Podobne rezultaty są pokazane dla modelu t-J-U, dla $J=0.1$ i $J=0.25$. Nie jest jasne dlaczego w czystym modelu Hubbarda nadprzewodnictwo ograniczone jest raczej do silnych korelacji. Wg. Autorów za ten efekt odpowiedzialne są nielocalne korelacje w wyższych rzędach rozwinięcia diagramowego. Sytuacja jest w mojej ocenie nierozstrzygnięta. Obliczenia przewidują dla wszystkich trzech badanych modeli istnienie nadprzewodnictwa o symetrii d-wave po stronie silnych korelacji $U \geq 10$ i przedziału domieszkowania $\delta \leq 0.35$, z optymalną wartością domieszkowania $\delta_{op} \approx 0.1-0.2$, która odpowiada maksymalnej wartości przerwy skorelowanej Δ_G . Ten rezultat jest zgodny z eksperymentem. Zanalizowano też charakter stanu nadprzewodzącego poprzez obliczenie wkładu energii kinetycznej do energii kondensacji, jeśli ten wkład jest dodatni to obszar taki nazwano non-BCS, jeśli ujemny to BCS-like. Porównano wkład energii kinetycznej z eksperymentem, lecz tylko dla modelu t-J-U i z uwzględnieniem wyższych rzędów rozwinięcia diagramowego, zgodność jest rozsądna. Badania eksperymentalne ARPES dla miedzianów wskazały na słabą zależność prędkości Fermiego w kierunku nodalnym oraz masy efektywnej od domieszkowania. Rysunek 5 Autoreferatu ([H1]) pokazuje bardzo dobre dopasowanie do eksperymentu uzyskane dla modelu t-J-U w metodzie DE-GWF.

Generalnie, najlepsze dopasowanie do danych eksperymentalnych (w stanie podstawowym) uzyskano dla modelu t-J-U z uwzględnieniem wyższych rzędów rozwinięcia. Model t-J-U jest modelem efektywnym jednopasmowym. Przyjęte wartości J są bliskie eksperymentalnym (0.1-0.3 eV), natomiast $U = 8\text{eV}$ (odpowiada całe odpychania kulombowskiego na jonach miedzi $U_{dd}=7-10\text{eV}$).

W pracy [H2] zbadano wpływ skorelowanego przeskoku elektronów (K) oraz odpychania kulombowskiego międzywęzłowego (V). Mechanizm nadprzewodnictwa typu skorelowanego przeskoku wprowadzono w pracy grupy Poznań-Grenoble nad parowaniem międzywęzłowym i następnie analizowano w pracach J. Hirscha i F. Marsiglio („hole superconductivity”).

W ramach metody DE-GWF, zbadano stan o symetrii d-wave dla modelu t-J-U-K-V (Rysunek 6 Autoreferatu). Efekt członu K prowadzi do asymetrii elektron-dziura. Wpływ tego wyrazu nie jest duży, dla symetrii d-wave po stronie domieszkowania dziurowego, lecz ogranicza nadprzewodnictwo po stronie domieszkowania elektronowego, przynajmniej dla $K \leq 0.2$, $V < 1$ i zestawu parametrów $U=21$, $J=0.25$ w modelu t-J-U. Innym efektem K jest redukcja zakresu nadprzewodnictwa niekonwencjonalnego (non-BCS) z malejącym domieszkowaniem (Fig.1 w pracy [H2]). Natomiast, wyraz V generalnie destabilizuje stan nadprzewodzący. Dodajmy, że zbliżone rezultaty odnośnie nadprzewodnictwa typu d-wave, w ramach tej samej metody DE-GWF, otrzymano dla rozszerzonego modelu Hubbarda z członem skorelowanego przeskoku K w pracy M.M. Wysokiński i J. Kaczmarczyk, J. Phys. Cond. Matt. 29, 085604 (2016).

Praca [H3] (PRB-2017) analizuje wpływ efektów międzyplaszczynowych. Część wewnątrz-plaszczynowa jest opisana modelem t-J-U, wprowadza się dodatkowo przeskok międzyplaszczynowy, oddziaływanie wymiany międzyplaszczynowe i wyrazy przeskoków par elektronów. Takie uogólnienie opisuje model dwu-warstwy (np. związek Bi-2212). W

badaniach przyjęto wewnątrzpłaszczyznowe parowanie z symetrią typu d-wave z domieszką międzypłaszczyznowego parowania typu s^\pm . Wyniki obliczeń metodą DE-GWF pokazano na Rysunkach 8 i 9. ([H3]). Główne wyniki dla jednopasmowego modelu t-J-U są zachowane, natomiast ciekawą rolę gra międzypłaszczyznowe tunelowanie par elektronów, które wzmacnia skorelowaną przerwę nadprzewodzącą i wskazuje na mechanizm wzrostu temperatury krytycznej w układach z większą ilością warstw. Dokonano także porównania obliczeń w stanie podstawowym z wybranymi wynikami eksperymentalnymi ARPES (m.in. tzw. bilayer splitting of the Fermi surface, prędkość Fermiego w kierunku nodalnym, relacja dyspersji kwazicząstek), uzyskując zgodność dla wybranych wartości domieszkowania dziurowego. (Fig.4 w pracy [H3]).

Kolejne tematy (prace [H4], [H5], [H6]) włączone do rozprawy to zbadanie stanów niekonwencjonalnych o złamanej symetrii i ich ewentualna koegzystencja z nadprzewodnictwem w miedzianach. Analizę przeprowadzono w ramach metody DE-GWF dla modelu t-t'-U-J a także z uwzględnieniem członu skorelowanego przeskoku (K) i międzywęzłowego odpychania kulombowskiego (V). W pracy [H4] (NJP-2017) omówiono uporządkowanie nematyczne, które wiąże się ze spontanicznym złamaniem symetrii obrotowej (C4) z zachowaniem symetrii translacyjnej. Efekt jest podobny do spontanicznej dystorsji ortorombowej, choć w pracy [H4] pojawia się jako wynik silnych korelacji elektronowych. Ponadto, analiza uporządkowania nematycznego wymaga wyjścia poza schemat RMFT-zerowe przybliżenie DE-GWF i uwzględnienia korelacji wyższych rzędów. Rysunek 11 Autoreferatu ([H4]) pokazuje wpływ porządku nematycznego na nadprzewodnictwo d-wave oraz s-wave. Ciekawy wynik to możliwa koegzystencja porządku nematycznego i nadprzewodzącego.

Problem porządku ładunkowego jest wyzwaniem dla nadprzewodnictwa w kupratkach. Szereg eksperymentów wskazuje na istnienie porządku typu fali gęstości ładunku (CDW) w tych materiałach. Zagadnienie to podjęto w pracach [H5] (J.Phys.CM-2017) i [H6] (PRB-2018). Obliczenia przeprowadzono zmodyfikowaną metodą RMFT [H5] jak i w DE-GWF, dla modelu t-J-U-V [H6]. Rysunek 14 pokazuje diagram fazowy z uwzględnieniem porządku antyferromagnetycznego i CDW dla dwóch parametrów modulacji. W pracy [H6] zaanalizowano w modelu t-J-U i w modelu Hubbarda zarówno porządek CDW na wiązaniach jak i na węzle, z wektorem modulacji $Q=(2\pi/3,0)$, oraz nadprzewodnictwo o symetrii typu d-wave i rozszerzonej s-wave. Otrzymano, że faza CDW koegzystuje z fazą PDW (pair density wave-fala gęstości par Coopera), w obszarze underdoped, stabilna faza nadprzewodnictwa typu d-wave pojawia się dla stosunkowo wysokich domieszkowań dziurowych (Fig.3. z pracy [H6]). Istnienie porządku typu PDW potwierdzono w niedawnych eksperymentach grupy J.C.S. Daviesa (2016) dla nadprzewodnika $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$.

Praca [H7] (PRB-2019) podejmuje problem nadprzewodnictwa o symetrii d-wave w realistycznym trójpasmowym modelu d-p płaszczyzny Cu-O, w ramach metody DE-GWF, a także porównanie z przypadkiem jednopasmowym. Faktycznie jest to zadanie bardzo ambitne. Dodatkowo dla stanu normalnego zastosowano metodę wariacyjną Monte-Carlo (klaster 4X4) oraz przybliżenie Hartree-Focka. Uzyskane wyniki dla stanu nadprzewodzącego i symetrii d-wave dają rezultaty zbliżone do tych otrzymanych w modelach jednopasmowych. M. in. pokazano, że amplitudy parowania d-d pomiędzy orbitalami d jonów miedzi dają dominujący wkład do nadprzewodnictwa. Podkreślono jednak istotną rolę tlenowych stopni swobody i energii charge-transfer pomiędzy węzłami atomów miedzi i tlenu (ϵ_{dp}).

Dwie ostatnie prace włączone do rozprawy [H8] (PRB-2014) i [H9] (J. Super. NM-2019), dotyczą możliwości spontanicznego parowania Coopera z niezerowym pędem środka masy w układzie z dominującym parowaniem międzypasmowym i z oddzielnymi płaszczyznami powierzchni Fermiego. Realizację takiego stanu typu FFLO (bez udziału zewnętrznego pola magnetycznego), Autorzy proponują dla nadprzewodników (pniktydków) na bazie żelaza. Obliczenia diagramu fazowego w płaszczyźnie temperatura (T)-wypełnienie pasma (n) wykonano w schemacie BCS dla modelu ciasnego wiązania 2 pasm dziurowych i 2 pasm elektronowych z międzypasmowym singletowym oddziaływaniem przyciągającym (Rysunek 23 Autoreferatu, [H8]). Z kolei w pracy [H9] przedstawiono możliwość wystąpienia nowej spontanicznej fazy trypletowej typu FFLO w modelu dwupasmowym z dominującym parowaniem międzypasmowym i możliwej realizacji w nadprzewodniku $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$.

W podsumowaniu, rozprawa habilitacyjna dra M. Zegrodnika zawiera szereg oryginalnych, i bardzo wartościowych rezultatów, szczególnie dla nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego w układach silnie skorelowanych elektronów, takich jak miedziany. Zdecydowanie mocną stroną tej habilitacji są publikacje w wiodących światowych czasopismach fizycznych, a w 5 pracach w Physical Review B dr M. Zegrodnik jest pierwszym i wiodącym autorem. Ważna jest także dyskusja i porównania obliczeń teoretycznych z eksperymentem dla nadprzewodników miedziowych, a także nadprzewodników na bazie żelaza.

Wyniki w niej zawarte, w mojej opinii dają bardzo dobry, ważny i zdecydowanie ciekawy wkład do fizyki nadprzewodników wysokotemperaturowych, a przedstawiona rozprawa spełnia w pełni wymagania pracy habilitacyjnej.

Pozostały dorobek Habilitanta jest znaczny i różnorodny. Dr M. Zegrodnik współpracuje naukowo z prof. J. Spałkiem od studiów magisterskich-2009 r. Opublikowali oni szereg wspólnych prac z teorii nadprzewodnictwa, głównie opartych na zastosowaniu metody wariacyjnej Gutzwillera. Ponadto, wśród rezultatów współautorskich prac, nie wchodzących w skład rozprawy, na wyróżnienie zasługują, osiągnięcia w następujących tematach:

- I) Analiza niekonwencjonalnego nadprzewodnictwa trypletowego i jego koegzystencja z magnetyzmem. Badanie te dotyczyły nadprzewodzących związków uranu (np. UGe_2) a także Sr_2RuO_4 . Ta tematyka była przedmiotem rozprawy doktorskiej Habilitanta. Obliczenia metodą Hartree-Focka jak i za pomocą tzw. statystycznie konzystentnego przybliżenia Gutzwillera przeprowadzono dla dwupasmowego modelu Hubbarda.
W sytuacji gdy $U > J$, stwierdzono, m.in. że korelacje elektronowe i reguła Hunda grają kluczową rolę w indukowaniu mechanizmu parowania w zakresie oddziaływań odpychających. (Prace [A19]-[A25], [A14] w spisie publikacji)
- II) Badania teoretyczne nadprzewodnictwa w metalicznych nanostrukturach. W pracach z P. Wójcikiem Autor analizował kwantowy efekt rozmiarowy w związku z paramagnetycznym polem krytycznym [A17], a także efekt orbitalny i krytyczne pole magnetyczne w nanowarstwach nadprzewodzących [A18]. Ponadto analizował problem fazy FFLO w nanodrutach [A11]-[A13], oraz własności transportowe heterostruktury: półmetal-magnetyk-nadprzewodnik (praca [A10]).
- III) Analiza diagramowa rozwinięcia funkcji falowej Gutzwillera, w której sumowanie diagramów wykonano w przestrzeni odwrotnej. (Praca [A2] wspólna z M. Fidrysiakiem i J. Spałkiem)
- IV) Zbadanie nadprzewodnictwa topologicznego w modelu skorelowanych fermionów na dwóch warstwach grafenowych skreślonych względem siebie o tzw. kąt

magiczny, w tym podanie diagramu fazowego stanu podstawowego (wysokocytowana praca w PRB z 2018r. [A4]).

Dr M. Zegrodnik jest dojrzałym badaczem, a Jego dorobek naukowy jest wartościowy. Jego prace są cytowane w literaturze, całkowita liczba cytowań wynosi 180 (113 bez autocytowań), a tzw. indeks Hirscha $h=8$. Jest fizykiem o szerokich zainteresowaniach badawczych. Dr Zegrodnik bierze aktywny udział w grantach krajowych Narodowego Centrum Nauki, Fundacji na rzecz Nauki Polskiej i Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego. W latach 2013-2019 był kierownikiem i wykonawcą w 5 grantach finansowanych ze środków NCN, FNP i MNiSW. Od 2017 r. jest kierownikiem projektu Sonata „Niekonwencjonalne fazy zaindukowane korelacjami elektronowymi w realistycznym modelu wielopasmowym nadprzewodników wysokotemperaturowych na bazie miedzi” przyznanego w konkursie NCN.

Dr Zegrodnik prowadzi owocną (wspólne publikacje) współpracę naukową z Instytutem Fizyki UJ i Instytutem Fizyki Barndeburskiego Uniwersytetu Technicznego w Cottbus, Niemcy, (dr hab. Jörg Bünemann). Był członkiem komitetu organizacyjnego trzech Konferencji n.t. nadprzewodnictwa, magnetyzmu i układów skorelowanych elektronów, w Zakopanem.

Za działalność naukową był nagradzany, Otrzymał Nagrody Naukowe Rektora Akademii Górniczo-Hutniczej w roku 2015, 2016 i 2018. Jest aktywnym dydaktykiem, m.in. na AGH współtworzył program nauczania dla przedmiotu: „Computational methods for nanosystems and correlated electron systems”. Był promotorem pomocniczym w zakończonym przewodzie doktorskim M. Abrama.

W podsumowaniu, biorąc pod uwagę całokształt bardzo wartościowego dorobku naukowego, a w szczególności rozprawę habilitacyjną, uważam że kwalifikują one w zupełności doktora Michała Zegrodnika, do stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Stawiam wniosek o przyjęcie recenzowanej rozprawy jako habilitacyjnej i dopuszczenie dra Michała Zegrodnika do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Uważam przedstawioną rozprawę habilitacyjną za ponadprzeciętną i proponuję jej wyróżnienie.

Poznań, 12. 11. 2019 r.

prof. dr hab. Roman Micnas

