Kraków, 26 maja 2011

dr hab. Adam Rycerz
Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego
Zakład Teorii Materii Skondensowanej i Nanofizyki

Ocena rozprawy doktorskiej mgra Jana Kaczmarczyka

Współczesna fizyka materii skondensowanej poświęca wiele uwagi materiałom, w których standardowy opis zachowania gazu elektronowego w sieci krystalicznej załamuje się. Ciekawymi przykładami takich materiałów są układy z efektywnie relatywistyczną relacją dyspersji elektronu (tzw. izolatory topologiczne i grafen) oraz liczne materiały, w których wzajemne oddziaływania elektronów sprawiają, że wielocząstkowa funkcja falowa gazu elektronowego nie może być przybliżana pojedynczym wyznacznikiem Slatera (tzw. układy z silnymi korelacjami elektronowymi). Do tej drugiej grupy zaliczają się w szczególności niekonwencjonalne nadprzewodniki, które są przedmiotem pracy doktorskiej mgra Jana Kaczmarczyka pt. *"Unconventional Superconductivity in Correlated Fermion Systems"*. Rozpoczynając ocenę tej pracy pragnę zaznaczyć, że w świetle niedawnych odkryć dotyczących m.in. mechanizmu nadprzewodnictwa w związku $CeCoIn_5$, wyniki przedstawione w pracy ponad wszelką wątpliwość wnoszą istotny wkład do teorii niekonwencjonalnego nadprzewodnictwa. Znajduje to potwierdzenie chociażby w postaci serii artykułów w najlepszych czasopismach fizycznych, których współautorem jest mgr Kaczmarczyk, a których wyniki są przedstawione w kolejnych częściach rozprawy. Nieliczne uwagi krytyczne, zawarte w dalszych częściach oceny, nie umniejszają tej zasadniczej zalety pracy, a powinny być traktowane jedynie jako próba rzetelnego wypełnienia obowiązku recenzenta.

W szczególności, w przedłożonej pracy wykazano, że tzw. fazy nadprzewodzące Fuldego-Ferrella (FF) i Larkina-Ovchinnikova (LO), w których pęd środka masy pary Coopera jest niezerowy, a które zostały zaproponowane teoretycznie jako możliwe fazy nadprzewodzące w niskich temperaturach i silnych polach magnetycznych, okazują się stabilne po uwględnieniu korelacji elektronowych. Ponadto, w pracy zaproponowano elegancką metodę doświadczalnej weryfikacji występowania fazy FF w nadprzewodniku, która polega na pomiarze przewodnictwa elektrycznego złącza metal normalny-

nadprzewodnik. Zależność przewodnictwa takiego układu od potencjału elektrochemicznego ma zupełnie inny przebieg w przypadku, gdy silne korelacje elektronowe są obecne w fazie nadprzewodzącej niż w przypadku bez korelacji. Wykazano wreszcie, że niekonwencjonalne nadprzewodnictwo może współistnieć z uporządkowaniem typu antyferromagnetycznego, a uporządkowanie takie dość nieoczekiwanie prowadzi do pojawienia się składowej trypletowej fazy nadprzewodzącej.

Omówię teraz pokrótce poszczególne części rozprawy.

Rozdziały 1.-3. stanowią wprowadzenie poprzedzające prezentację oryginalnych wyników Autora w dalszych rozdziałach. Wyjaśniono tutaj (Rozdział 1.) znaczenie kluczowych pojęć, jak fazy FF i LO, a także zreferowano najważniejsze wyniki doświadczalne dla związku $CeCoIn_5$. Następnie (Rozdział 2.), omówiono podstawowe koncepcje i metody teoretycznego opisu rozważanych układów, w tym przybliżenie Gutzwillera oraz nową metodę opracowaną niedawno w zespole profesora Józefa Spałka, czyli tzw. statystycznie konsystentne przybliżenie Gutzwillera (SGA: *Statistically-consistent Gutzwiller Approximation*), wyjaśniono także koncepcję teoretyczną tzw. prawie zlokalizowanych cieczy Fermiego. Część wstępną pracy zamyka Rozdział 3., w którym przedstawiono wyniki zastosowania metody SGA do opisu stanu normalnego, zarówno dla gazu elektronowego w pustej przestrzeni jak i na sieci kwadratowej modelowanej w ramach przybliżenia ciasnego wiązania. Oceniając rozdziały 1.-3. ograniczę się do stwierdzenia, że ta część pracy napisana jest wzorowo: biorąc pod uwagę liczbę omówionych zagadnień jest niezwykle krótka i zwięzła, a przy tym napisana jasno i zrozumiale, co bardzo ułatwia lekturę dalszych, zasadniczych części pracy.

Rozdziały 4.-6. zawierają opis kluczowych wyników otrzymanych przez Autora w okresie studiów doktoranckich i w dużej części opublikowanych w najlepszych czasopismach fizycznych, jak amerykańskie *Physical Review B*, brytyjski *Journal of Physics: Condensed Matter*, czy holenderska *Physica C*.

Rozdział 4., poświęcony jest zagadnieniu występowania faz FF/LO w układzie z silnymi korelacjami elektronowymi. Jako punkt wyjścia do analizy problemu przyjęto Hamiltonian o strukturze podobnej do Hamiltonianu Bardeena-Coopera-Schriefera (BCS), w którym dopuszczono możliwość parowania elektronów z niezerowym pędem środka masy, co prowadzi do pojawienia się zależności przerwy nadprzewodzącej od tego pędu. Rozważono osobno przypadki symetrii typu s i typu d przerwy nadprzewodzącej, oraz zależności (lub jej braku) masy efektywnej elektronu od wartości składowej spinu równoległej do kierunku zewnętrznego pola magnetycznego. (Zależność taka może się pojawiać w układach, w których masy efektywne są duże, umieszczonych w silnym polu

magnetycznym.) Pokazano następnie, że warunek na minimum energii swobodnej układu prowadzi do układu równań całkowych na poszczególne parametry uporządkowania (w tym zależną od pędu przerwę nadprzewodzącą). Taki układ równań rozwiązywano następnie numerycznie dla ośmiu, zasadniczo różnych sytuacji fizycznych, określonych poprzez niezależny wybór symetrii przerwy (s lub d), zależności (lub jej braku) masy efektywnej od spinu, oraz tego, czy rozważamy dwuwymiarowy gaz elektronów z paraboliczną relacją dyspersji czy też relacją dyspersji otrzymaną z rozwiązania modelu ciasnego wiązania dla sieci kwadratowej (często dyskutowanej w literaturze dotyczącej nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego). Przedstawione wyniki numeryczne pokazują, że niekonwencjonalne nadprzewodnictwo będzie pojawiać się zdecydowanie częściej w układach z symetrią typu d i ze spinowym rozszczepieniem masy efektywnej niż w pozostałych rozważanych przypadkach. (Rodzaj relacji dyspersji elektronu nie ma tutaj zasadniczego znaczenia.) Wyniki Autora dowodzą, że silne korelacje elektronowe i powiązane z nimi wysokie wartości mas efektywnych elektronów stabilizują fazy typu FF i LO, co stanowi cenną wskazówkę dla doświadczalnych poszukiwań takich faz. Rozdział zamyka piękny opis relacji przedstawionych wyników z przeprowadzonym niedawno doświadczeniem dla związku $CeCoIn_5$. Warto nadmienić, że artykuł opublikowany w *Physical Review B* w 2009 roku, w którym opisano wyniki zawarte w Rozdziale 4. pracy, a którego pierwszym autorem jest mgr Kaczmarczyk, spotkał się już z zauważalnym odzewem środowiska naukowego.

Rozdział 5., najdłuższy w całej pracy, poświęcony jest pięknemu zjawisku tzw. odbicia Andreeva, które występuje na granicy nadprzewodnika i metalu w stanie normalnym, a polega na tym, że elektron w wyniku zderzenia z taką granicą od strony metalu zamienia się w dziurę poruszającą się wstecz wzdłuż toru elektronu, tak aby po stronie nadprzewodnika mogła powstać para Coopera i elementarne prawa zachowania były spełnione. Autor wykazał, że widmo przewodnictwa takiego złącza, w przypadku gdy mamy do czynienia z nadprzewodnikiem niekonwencjonalnym mocno różni się od widma złącza metal-nadprzewodnik konwencjonalny. Przedstawiona analiza teoretyczna dostarcza zatem testu doświadczalnego, który pozwoli odróżnić czy konkretny układ jest nadprzewodnikiem konwencjonalnym czy też niekonwencjonalnym. Propozycja nowego testu doświadczalnego to kluczowy punkt w rozwoju każdej teorii fizycznej, wyniki przedstawione w Rozdziale 5. można zatem uznać za potencjalne najważniejsze w całej pracy doktorskiej. Artykuł dotyczący odbicia Andreeva, którego mgr Kaczmarczyk ponownie jest pierwszym autorem ukazał się zaledwie kilka miesięcy temu, także na reakcję środowiska naukowego trzeba będzie jeszcze poczekać. Jestem jednak przekonany, że artykuł ten nie przejdzie bez echa. Szkoda, że podobnej analizy

teoretycznej nie przeprowadzono dla złącza Josephsona pomiędzy dwoma nadprzewodnikami niekonwencjonalnymi, gdyż efekt Josephsona - zwłaszcza w swojej wersji zmiennoprądowej - jest prawdopodobnie najpiękniejszym zjawiskiem związanym z nadprzewodnictwem, i jednym z kilku zjawisk w przyrodzie, w których wielkość bezpośrednio mierzona wyraża się jedynie przez stałe fundamentalne, jak ładunek elementarny, stała Plancka, czy prędkość światła w próżni. Zjawiska Josephsona nie ma też na przedstawionej (w Rozdziale 7.) liście problemów, którymi Autor planuje poświęcić uwagę w przyszłej pracy naukowej. Uważam za wskazane, aby zjawisko Josephsona wśród takich problemów uwzględnić.

Rozdział 6., zawiera dyskusję teoretyczną problemu współistnienia uporządkowania antyferromagnetycznego i nadprzewodnictwa, ze szczególnym uwzględnieniem nadprzewodnictwa niekonwencjonalnego. Punkt wyjścia do takiej dyskusji stanowi model t-J na sieci kwadratowej z wyrazem typu Zeemana, do którego zastosowano uogólnienie metody Gutzwillera, zaproponowane niedawno przez Noboru Fukushimę z Akademii Chińskiej w Tajpej. Autor twierdzi, że metoda taka odtwarza wyniki otrzymane wcześniej w ramach obliczeń typu Monte Carlo, które wiążą się ze znacznie większymi kosztami obliczeniowymi niż metody wyrosłe z przybliżenia Gutzwillera. Szkoda, że wyniki te nie zostały zreferowane bardziej szczegółowo, zdecydowanie wskazany byłby przedruk kluczowych rysunków z cytowanej pracy Fukushimy z 2008 roku, gdyż bardzo poprawiłoby to jasność wywodu. Głównym wynikiem rozdziału jest diagram fazowy w przestrzeni domieszkowanie-pole magnetyczne, na którym widoczny jest obszar współistnienia antyferromagnetyzmu i nadprzewodnictwa. Dokładniej, współistnienie tych dwóch faz zachodzi dla domieszkowań większych od krytycznej wartości 0.935 elektronu na węzeł i niskich pól magnetycznych. Przejście do fazy antyferromagnetycznej przy wzroście domieszkowania jest przy tym ciągłym przejściem fazowym, zaś przejście do fazy ferromagnetycznej przy wzroście pola jest przejściem fazowym I rodzaju. Współistnieniu nadprzewodnictwa i antyferromagnetyzmu w przedstawionym modelu towarzyszy zawsze niezerowa składowa trypletowa parametru porządku, co wydaje się bardzo istotnym wynikiem dla zrozumienia mechanizmu nadprzewodnictwa w układach magnetycznych w ogóle. Otrzymany diagram fazowy odtwarza zasadnicze cechy badanego niedawno przez zespół profesora Franka Steglicha związku $CeCoIn_5$, w którym część atomów indu w celu zmiany wypełnienia pasma zastąpiono kadmem. Wyniki Rozdziału 6. nie zostały jeszcze opublikowane, a jestem przekonany, że ich publikacja będzie miała spore znaczenie dla młodej dziedziny badań nadprzewodnictwa układów magnetycznych. Pomino drobnych uwag natury technicznej przedstawionych wyżej, rodział ten zdecydowanie oceniam jako bardzo dobry.

Rozdział 7. stanowi podsumowanie całej rozprawy, zawiera też spis problemów, którymi Autor planuje zająć się w dalszej pracy naukowej. Rozdział napisany jest jasno i przejrzyście; jedyną wątpliwością jaka nasuwa się w tym miejscu jest brak na tej liście zjawiska Josephsona dla nadprzewodników niekonwencjonalnych. Czy istnieją jakieś fundamentalne powody, dla których zjawiska nie da się lub nie warto analizować wykorzystując metody opisu teoretycznego przedstawione w pracy?

Oceniając całość pracy doktorskiej należy podkreślić, że została ona przygotowana z niezwykłą starannością. Pomimo, że jest napisana w języku angielskim, czyta się ją z prawdziwą przyjemnością, a błędy literowe praktycznie nie występują. Praca zawiera także piękne i poglądowe rysunki, których przygotowanie na pewno było bardzo pracochłonne. Mam nadzieję, że wersja elektroniczna pracy zostanie wkrótce udostępniona w internecie, gdyż na pewno będzie wartościową lekturą dla wielu osób zainteresowanych współczesną fizyką materii skondensowanej w ogólności, a niekonwencjonalnym nadprzewodnictwem w szczególności.

Podsumowując, przedstawiona praca spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim, w szczególności świadczy o biegłości Autora w posługiwaniu się metodami analitycznymi i numerycznymi teoretycznej fizyki materii skondensowanej, co jest dodatkowo udokumentowane jego imponującym, jak na doktoranta, dorobkiem w postaci ośmiu artykułów recenzowanych. Wnioskuję o dopuszczenie mgra Jana Kaczmarczyka do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Do recenzji załączono także wniosek o wyróżnienie pracy, ze szczegółowym uzasadnieniem. Tutaj zaznaczę jedynie iż uważam, że praca jest wybitna i zdecydowanie zasługuje na przyznanie wyróżnienia, jak również na przedstawienie do Nagrody Ministra Nauki lub innej prestiżowej nagrody przewidzianej dla prac doktorskich.

Adam Rycerz