UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

INSTYTUT FIZYKI IM. MARIANA SMOLUCHOWSKIEGO
*Zakład Teorii Materii Materii Skondensowanej i Nanofizyki*
**dr hab. Adam Rycerz**
E-mail: rycerz@th.uj.edu.pl
WWW: http://th.if.uj.edu.pl/~adamr/

Kraków, 6 sierpnia 2015

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej Pana dr. Karola Szałowskiego "Magnetyzm nanostruktur grafenowych - zagadnienia teoretyczne"**

Rozprawę habilitacyjną dr. Karola Szałowskiego stanowi zbiór sześciu artykułów naukowych, z których dwa zostały opublikowane w czasopiśmie *Physical Review B* (pozycje H1 i H5 wg notacji Autora), a pozostałe w czasopismach: *Physica E* (praca H2), *Journal of Physics: Condensed Matter* (praca H3), *Journal of Applied Physics* (praca H4), oraz *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (praca H6). Wszystkie wspomniane artykuły ukazały się w latach 2011-2015 i są monoautorskie. Do rozprawy dołączony jest obszerny i starannie zredagowany autoreferat (53 strony), zawierający szczegółowy opis dorobku naukowego, jak również aktywności dydaktycznej i popularyzatorskiej habilitanta.

Przed przystąpiem do oceny samej rozprawy habilitacyjnej, omówię teraz krótko całość dorobku naukowego dr. Karola Szałowskiego.

W ujęciu ilościowym, na dorobek naukowy habilitanta składa się 35 artykułów naukowych (w tym 25 opublikowanych po nadaniu stopnia doktora), z których 31 jest rozpoznawanych przez *Science Citation Index Expanded*. Łączna liczba cytowań wszystkich artykułów wynosi 148 (98 cytowań po odjęciu własnych), zaś współczynnik Hirscha wynosi 7. Są to wartości typowe dla osób ubiegających się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie fizyki teoretycznej materii skondensowanej. Co ciekawe, najczęściej cytowaną (21 razy) spośród wszystkich pozycji w dorobku habilitanta jest opublikowany na drugim roku studiów magisterskich artykuł: *The effect of the solar eclipse on the air temperature near the ground* [K. Szałowski, J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. **64**, 1589-1600 (2002)], w którym opisane są badania prowadzone jeszcze w okresie licealnym, nagrodzone w VIII konkursie międzynarodowym *First Step to Noble Prize in Physics* (1999/2000). Fakt ten dobitnie pokazuje, jak ważne jest zachowanie właściwego

dystansu przy uwzględnianu danych bibliometrycznych w procedurach związanych z nadawaniem stopni naukowych.

W swojej rozprawie habilitacyjnej dr Szałowski podjął niełatwe zagadnienie roli korelacji elektronowych i magnetyzmu w nanostrukturach grafenowych. Ta grupa problemów była przez szereg lat niedoceniana w środowisku fizyków badających grafen i inne *materiały dirakowskie*, z uwagi na rozpowszechnione przekonanie, że korelacje elektronowe są w tych układach mało istotne. Za przyczynę takiego stanu rzeczy można uznać nadinterpretację pewnych wyników z zakresu fizyki matematycznej, a w szczególności twierdzenia Mermina-Wagnera o nieistnieniu uporządkowania dalekozasięgowego w układach niskowymiarowych, jak również twierdzenia o wiriale, z którego można wywieść fakt nieistnienie reżimu silnych oddziaływań w dwuwymiarowym gazie elektronów o dirakowskiej relacji dyspersji [zob. Stokes *i in.*, Philos. Mag. Lett. **93**, 672-679 (2013)]. Wyniki te nie mają jednak zastosowania w przypadku nanoukładów, których małe rozmiary eliminują niestabilności w podczerwieni, zaś kwantowy efekt rozmiarowy istotnie modyfikuje charakter relacji dyspersji w obszarze niskich energii kwazicząstek. Pomimo że istnienie uporządkowania magnetycznego w pewnych układach grafenowych zostało przewidziane teoretycznie krótko po odkryciu grafenu [zob. np. Yazyev, Rep. Prog. Phys. **73**, 056501 (2010)], jednoznaczne potwierdzenie doświadczalne takich przewidywań pojawiło się zupełnie niedawno [Hong *i in.*, ACS Nano **7**, 10011-10022 (2013)]. Prace teoretyczne dr. Szałowskiego wpisują się zatem w aktualny, i niezwykle obiecujący z punktu widzenia przyszłych zastosowań praktycznych (np. w kontekście budowy pamięci magnetycznych o wysokiej gęstości zapisu informacji), nurt badań nanomagnesów molekularnych na bazie układów węglowych.

Głównym celem badań przedstawionych w recenzowanej rozprawie było zrozumienia natury oddziaływań efektywnych (w szczególności wymiany pośredniej typu RKKY) zlokalizowanych momentów magnetycznych w nanoukładach grafenowych, poznanie diagramów fazowych tych układów, a także sprawdzenie możliwości kontrolowanej zmiany znaku wspomnianych oddziaływań (tj. zmiany charakteru oddziaływań z ferromagnetycznego na antyferromagnetyczny) za pośrednictwem parametrów zewnętrznych, takich jak pola elektryczne i magnetyczne. Od strony metodologicznej, dynamika elektronów w płatku grafenowym była analizowana w ramach modelu ciasnego wiązania uzupełnionego w wyraz Hubbarda w przybliżeniu pola średniego, zaś oddziaływanie ze zlokalizowanymi momentami magnetycznymi opisywał hamiltonian typu Kondo.

W pracy H1 [Phys. Rev. B **84**, 205409 (2011)] habilitant pokazał, że znak oddziaływania efektywnego momentów zlokalizowanych w małym płatku zbudowanym

z 16 atomów węgla (rozmieszczonych przestrzennie jak w cząsteczce pirenu) zależy od wypełnienia elektronowego: dla nieparzystej liczby elektronów w układzie może pojawiać się sprzężenie ferromagnetyczne, podczas gdy dla parzystej liczby elektronów dominuje standardowe oddziaływanie antyferromagnetyczne. W kolejnych pracach analiza opisanego zagadnienia została rozszerzona na szereg innych nanoukładów grafenowych, takich jak trójkątna kropka kwantowa z krawędziami typu zigzag rozważana w pracy H2 [Physica E **52**, 46 (2013)], nanożeberko z krawędziami typu armchair [zob. praca H3 - J. Phys.: Condens. Matter **25**, 166001 (2013)], czy też krótki odcinek nanożeberka z krawędziami typu zigzag [zob. praca H5 - Phys. Rev. B **90**, 085410 (2014)]. W pracach H4 i H6 badano z kolei namagnesowanie pojawiające się na krawędziach nanoukładów umieszczonych w zewnętrznych polach elektrycznym i magnetycznym; układami tymi były dwa trójkąty grafenowe z krawędziami typu zigzag połączone wspólnym wierzchołkiem [zob. praca H4 - J. Appl. Phys. **114**, 243908 (2013)] oraz trójkąt grafenowy z krawędziami typu armchair [zob. praca H6 - J. Magn. Magn. Mater. **382**, 318 (2015)].

Chociaż zastosowane w omawianych pracach przybliżenia są zasadniczo uważane za stosunkowo proste, jeśli nie elementarne, w kontekście fizyki silnie skorelowanych układów elektronowych, istnieje jednak szereg przesłanek, że przybliżenia takie mogą być całkowicie wystarczające do poprawnego opisu stanów kwantowych małych układów grafenowych, w których to układach oddziaływania elektron-elektron są stosunkowo słabe. Szczegółową dyskusję tego problemu zawiera np. praca Feldner *i in.*, Phys. Rev. B **81**, 115416 (2010), w której porównano własności grafenowych kropek kwantowych (podobnych do rozważanych przez habilitanta) w stanie podstawowym otrzymane w ramach teorii pola średniego dla modelu Hubbarda i w ramach metody kwantowego Monte Carlo. Wyniki dotyczące wielkości mierzalnych, otrzymane w ramach obu metod, są bardzo zbliżone dla wartości oddziaływania $U/t < 2$, co wydaje się zakresem wystarczającym dla dyskusji realnych układów grafenowych; jakkolwiek w literaturze przedmiotu można też znaleźć opinie odmienne, a niektórzy autorzy argumentują nawet, że efektywna wartość parametru hubbardowskiego $U/t$ może być dla swobodnego grafenu większa od 3 [zob. np. Wehling i in., Phys. Rev. Lett. **106**, 236805 (2011)], co stawiałoby pod znakiem zapytania wartość wyników otrzymanych w ramach teorii pola średniego.

Trudno zarysowaną powyżej kontrowersje rozstrzygnąć jednoznacznie, nie ulega jednak wątpliwości, że przedstawione w pracach habilitanta analizy własności grafenowych układów magnetycznych, choć prowadzone w ramach uproszczonych modeli, stanowią co najmniej wartościowy przyczynek niezbędny dla zrozumienia fizyki tych układów. Wydaje się wysoce prawdopodobne, że przebieg najważniejszych ze zjawisk przewidzianych teoretycznie przez dr. Szałowskiego, jak zmiana znaku

efektywnego oddziaływania typu RKKY w określonych sytuacjach, jest jakościowo poprawny i nie uległby istotnym zmianom po ewentualnym (bardzo trudnym od strony technicznej) uwzględnieniu wpływu korelacji elektronowych w sposób ścisły.

Jestem zatem całkowicie przekonany, że przedstawiona mi do oceny rozprawa spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom habilitacyjnym, a całkowity dorobek naukowy dr. Karola Szałowskiego jest, zarówno pod względem jakościowym jak i ilościowym, odpowiedni do nadania stopnia naukowego doktora habilitowanego w zakresie fizyki. Zdecydowanie rekomenduję zatem pozytywne rozstrzygnięcie Jego postępowania habilitacyjnego.

Adam Rycerz