

Recenzja
rozprawy doktorskiej mgr Magdaleny Barańskiej zatytułowanej

*Analiza układów silnie skorelowanych w ujęciu ciągłej
transformacji kanonicznej*

Zastosowanie ciągłej transformacji kanonicznej pozwala ominąć ograniczenia metody rachunku zaburzeń i rozszerzyć dyskusję poza reżim „małego parametru”, co ma szczególne znaczenie w analizie układów silnie skorelowanych. Badaniem takich właśnie układów zajęła się mgr Magdalena Barańska w rozprawie doktorskiej pt. „Analiza układów silnie skorelowanych w ujęciu ciągłej transformacji kanonicznej”. Rozprawa składa się z dwóch części dotyczących różnych zagadnień fizycznych, które łączy wspólna metoda badawcza polegająca na zastosowaniu ciągłej transformacji kanonicznej. Przedmiotem pierwszej części rozprawy jest wielociałowy efekt Kondo wynikający z antyferromagnetycznego sprzężenia kwantowej domieszki z elektronami ośrodka. Opisane badania dotyczą efektu zachodzącego w nanoskopowych heterozłączach reprezentowanych przez ogólny model: metal - kropka kwantowa (odpowiadająca domieszce) – nadprzewodnik. Nowatorstwo przedstawionej analizy polega na uwzględnieniu możliwości indukowania stanu nadprzewodzącego w kropce kwantowej przez sąsiadujący z nią nadprzewodnik i zbadaniu wpływu indukowanego nadprzewodnictwa na temperaturę Kondo. W drugiej części rozprawy zawarta jest dyskusja diamagnetycznej odpowiedzi niekoherentnych par Coopera, które charakteryzują układ znajdujący się w temperaturze pomiędzy temperaturą niestabilności nadprzewodzącej T_C i temperaturą otwarcia pseudoszczeliny w widmie fermionowym T^* . Motywacją tych teoretycznych badań były pomiary wykazujące istnienie diamagnetyzmu powyżej temperatury krytycznej w niektórych miedzianach.

Promotorem rozprawy doktorskiej jest prof. dr hab. Tadeusz Domański. Przedłożona rozprawa składa się z pięciu rozdziałów, z których dwa pierwsze (Wprowadzenie i Metoda ciągłej transformacji kanonicznej) uzasadniają znaczenie metody ciągłej transformacji kanonicznej w opisie układów skorelowanych oraz przedstawiają jej zarys. Rozdziały trzeci i czwarty zawierają oryginalne wyniki badań Doktorantki, a rozdział piąty stanowi

podsumowanie. W rozprawie zawarte są jeszcze trzy dodatki, spis literatury, lista publikacji będących dorobkiem naukowym mgr Magdaleny Barańskiej i wykaz konferencji, w których uczestniczyła. Ogółem rozprawa liczy 102 strony oraz zawiera 108 pozycji bibliograficznych. Zasadnicze rezultaty rozprawy zostały zawarte w siedmiu publikacjach, których Doktorantka jest współautorką: 1 – Physical Review B z 2011 roku, 1 – Scientific Reports z 2016 roku, 1 – Philosophical Magazine z 2015 roku, 1 – Low Temperature Physics z 2016 roku, 3 – Acta Physica Polonica A z 2012 i 2014 roku, oraz preprincie z roku 2014 dostępnym w bazie arXiv/Los Alamos. Wymienione prace powstały przy udziale promotora prof. dr. hab. Tadeusza Domańskiego (wszystkie prace), dr. J. Barańskiego, dr. G. Górskiego, dr. I. Weymanna oraz dr. A. Solovyova.

Do oryginalnych rezultatów Doktorantki należy analiza korelacji typu Kondo na kropce kwantowej przedstawiona w rozdziale trzecim rozprawy. Najważniejszą tezę przedstawionej analizy jest pokazanie, że indukowane parowanie nadprzewodzące może mieć konstruktywny wpływ na efekt Kondo w obiektach nanoskopowych. Korzystając z pomocniczego hamiltonianu (3.4), który w sposób efektywny uwzględnia bliskość rezerwuaru nadprzewodzącego, oraz przybliżając oddziaływanie wymienne potencjałem typu Hartree-Focka-Bogoliubova, Doktorantka wykazuje, że dla dostatecznie dużego sprzężenia kropki kwantowej z nadprzewodzącą elektrodą następuje wzmocnienie antyferromagnetycznego sprzężenia wymiennego i zwiększenie temperatury Kondo. Fundamentalne znaczenie w przeprowadzonej analizie ma zastosowanie przybliżenia typu średniego pola, które umożliwia otrzymanie zamkniętego układu równań *flow* i dlatego wydaje się niezbędne w metodzie ciągłej transformacji kanonicznej. Wpływ tego kroku na końcowy wynik jest podkreślony przez mgr Magdalenę Barańską, która wskazuje na pewną dowolność takiego postępowania i na wynikające z niej zasadnicze różnice przewidywań. W podrozdziałach 3.5.1 i 3.5.2 Doktorantka bada konsekwencje zastosowania dwóch różnych typów przybliżenia średniego pola – przybliżenia Hartree-Focka (równanie (3.22)) i przybliżenia Hartree-Focka-Bogoliubova (równanie (3.23)). Ogólniejsze przybliżenie oddziaływania wymiennego typu Hartree-Focka-Bogoliubova (Podrozdział 3.5.2) uwzględnia możliwość parowania elektronów kropki kwantowej, które jest indukowane przez bliskość obszaru nadprzewodzącego. Takie indukowane nadprzewodnictwo jest zdeterminowane przez parametr porządku χ_d wynikający wprost ze średniopolowej formy oddziaływania wymiennego typu Hartree-Focka-Bogoliubova, który wraz z przerwą energetyczną Δ_d w widmie wzbudzeń jednocząstkowych określa wielkość sprzężenia wymiennego typu Kondo. Indukowane nadprzewodnictwo χ_d prowadzi do wzrostu temperatury

Kondo dla wartości sprzężenia kropki kwantowej z elektrodą nadprzewodzącą Γ_s rzędu energii oddziaływania kulombowskiego zlokalizowanych elektronów kropki kwantowej U_d . Doktorantka wskazuje, że efekt wzrostu temperatury Kondo może mieć związek z kwantowym przejściem fazowym singlet-dublet, co uzasadnia postacią widma niskoenergetycznych wzbudzeń jednocząstkowych kropki kwantowej. Rezultat ten odbiega od wyniku przedstawionego w podrozdziale 3.5.1, w którym oddziaływanie wymienne zostało uproszczone przez przybliżenie Hartree-Focka. W zredukowanym przybliżeniu Hartree-Focka nadprzewodzący ośrodek wpływa na stany elektronowe kropki kwantowej jedynie przez indukowanie przerwy energetycznej Δ_d w widmie wzbudzeń jednocząstkowych, która ma destruktywny wpływ na antyferromagnetyczne sprzężenie wymienne i prowadzi do obniżenia temperatury Kondo. Wynikające z przybliżenia Hartree-Focka osłabienie korelacji typu Kondo przez rosnące sprzężenie kropki kwantowej z elektrodą nadprzewodzącą jest tłumaczone jako skutek konkurencji między porządkami nadprzewodzącym i magnetycznym, a także jako konsekwencja indukowanej przerwy energetycznej Δ_d i tym samym zmniejszonej liczby stanów w otoczeniu poziomu Fermiego kropki kwantowej. Wynik ten jest jakościowo zgodny z dotychczasowymi rezultatami eksperymentalnymi. Z drugiej strony, otrzymany w ramach przybliżenia Hartree-Focka-Bogoliubova zastanawiający wzrost temperatury Kondo jest zgodny z niedawnymi przewidywaniami numerycznej grupy renormalizacyjnej. Uważam, że analiza dwóch różnych typów przybliżenia średniego pola, które jest nie do uniknięcia w metodzie ciągłej transformacji kanonicznej i wskazanie na możliwość otrzymania tak różnych wyników jest sama w sobie wartościowym rezultatem poznawczym dotyczącym metody ciągłej transformacji kanonicznej i może mieć znaczenie w jej zastosowaniach do opisu zjawisk zachodzących na styku metal-nadprzewodnik. Podsumowując, rezultaty otrzymane w tej części rozprawy oceniam bardzo wysoko, choć mam drobne zastrzeżenia dotyczące sposobu ich dyskusji. Moje uwagi dotyczą między innymi opisu zależności sprzężenia wymiennego J_{exch} od parametru Δ_d , która jako funkcja $J_{\text{exch}}(\Delta_d)$ jest przedstawiona na Rys. 3.17. W zamieszczonej na str. 38 analizie tej zależności Doktorantka odnosi się jednak do Rys. 3.15, a Rys. 3.17 pozostawia bez komentarza. W tej samej części rozprawy znajdują się także rysunki 3.8-3.12 zestawiające rozwiązania poszczególnych równań *flow* otrzymane dla przybliżeń Hartree-Focka i Hartree-Focka-Bogoliubova, do których również brak odniesienia w tekście rozprawy.

Otrzymanie w ujęciu ciągłej transformacji kanonicznej dwóch różnych rozwiązań odpowiadających przybliżeniom Hartree-Focka i Hartree-Focka-Bogoliubova stało się dla

Doktorantki motywacją do ponownego rozwiązania zagadnienia Kondo w heterozłaczach metal - kropka kwantowa - nadprzewodnik metodą jednokrokowej transformacji Schrieffera-Wolffa (Podrozdział 3.5.3). To rozwiązanie należy także zaliczyć do oryginalnych wyników Doktorantki i jej Promotora ponieważ uogólnia ono metodę transformacji Schrieffera-Wolffa przez uwzględnienie efektu indukowania parowania prowadzącego do nadprzewodnictwa kropki kwantowej. W zamyśle Doktorantki, tak to odczytałem z rozprawy, wyniki otrzymane przez zastosowanie transformacji jednokrokowej miały pomóc w ocenie adekwatności przybliżeń średniego pola Hartree-Focka i Hartree-Focka-Bogoliubova do opisu zagadnienia metodą ciągłej transformacji kanonicznej. Porównanie wyników metody transformacji Schrieffera-Wolffa i ciągłej transformacji kanonicznej wykorzystującej przybliżenie średniego pola Hartree-Focka-Bogoliubova zostało przedstawione na Rys. 3.15 i 3.17. Widoczny jest na nich charakterystyczny dla obu podejść wzrost wartości antyferromagnetycznego sprzężenia wymiennego dla wartości sprzężenia kropki kwantowej z elektrodą nadprzewodzącą Γ_s nieprzekracających wielkości rzędu U_d . Niestety, pomimo przedstawienia wyników Doktorantka nie decyduje się na krótki choćby komentarz porównujący przewidywania tych dwóch metod i odnoszący się do wcześniej rozważanego przybliżenia Hartree-Focka, który byłby naturalnym zamknięciem rozdziału.

Metoda ciągłej transformacji kanonicznej bardzo często prowadzi do generacji dodatkowych wyrażeń hamiltonianu, co Doktorantka zaznacza w zdaniu komentarza pod bardzo rozbudowanym hamiltonianem opisanym równaniami (3.10)-(3.18): „Nie jest oczywistym, które z nich (wyrażeń hamiltonianu – przyp. GH) są istotne dla fizyki opisywanej danym modelem.” Przykład takiego nietypowego, ale intuicyjnie akceptowalnego oddziaływania, które zostało „wygenerowane” przez transformację kanoniczną i wyraża parowanie elektronów kropki kwantowej z elektronami metalicznej elektrody jest opisany w podrozdziale 3.6, który jest polskim tłumaczeniem rozdziału ze wspólnego artykułu mgr Magdaleny Barańskiej i jej Promotora (Ref. [54]). Szkoda, że Doktorantka nie skorzystała z możliwości szerszej wypowiedzi jaką daje rozprawa doktorska i nie podjęła próby rozwinięcia tego tematu.

Jednym z ważniejszych wyników rozprawy jest otrzymanie funkcji odpowiedzi typu prąd-prąd modelu bozonowo-fermionowego w ramach metody *flow equation* rozwiniętej dla tego typu układów przez promotora rozprawy prof. Domańskiego i prof. Ranningera (Rozdz. 4). Zastosowanie procedury ciągłej transformacji kanonicznej w teorii liniowej odpowiedzi pozwoliło wyznaczyć składową nadciekłą układu fermionów i wskazać przedział temperaturowy, w którym jej zmienność odpowiada słabemu diamagnetyzmowi, co jest jakościowo zgodne z wynikami

doświadczalnymi otrzymanymi przez grupę z Princeton. Otrzymany wynik potwierdza sugerowany, zarówno przez badania eksperymentalne jak i teoretyczne, szczerkowy diamagnetyzm układu niekoherentnych bozonów – par Coopera. Badania te stanowią niewątpliwy wkład do zrozumienia obszaru diagramu fazowego nadprzewodników wysokotemperaturowych odpowiadającego występowaniu pseudoszczeliny.

Dokonując oceny przedłożonej rozprawy należy przede wszystkim podkreślić jej bardzo wysoki poziom merytoryczny, wynikający z zastosowania metody ciągłej transformacji kanonicznej oraz użycia zaawansowanych metod numerycznych. Przedstawione w rozprawie doktorskiej mgr Magdaleny Barańskiej zagadnienia są konsekwentnie rozwiązywane w ramach tego podejścia, a słuszność stosowania wybranej metody jest uzasadniana przez nawiązanie do wyników doświadczalnych. Przeprowadzone badania miały na celu analizę układów silnie skorelowanych poprzez zastosowanie procedury ciągłej transformacji kanonicznej. Postawiony cel rozprawy doktorskiej mgr Magdaleny Barańskiej został w znacznym stopniu osiągnięty, a otrzymane rezultaty uzasadniają trafność przyjętych metod badawczych. Stwierdzam, że przedstawiona rozprawa doktorska stanowi bardzo bogatą i wnikliwą dyskusję własności układów z niediagonalnym porządkiem w ujęciu ciągłej transformacji kanonicznej. Ponadto, analizie poddano układy fizyczne, których zrozumienie jest ważne zarówno ze względów poznawczych, jak i ze względu na ich potencjalne zastosowania. Wybraną tematykę, rozwinięty formalizm, przeprowadzone obliczenia numeryczne w połączeniu z dokonaną analizą oraz uzyskane rezultaty oceniam bardzo wysoko, jako wnoszące znaczący wkład do zrozumienia własności układów silnie skorelowanych. Dodam, że rozprawę przeczytałem z dużym zainteresowaniem. Dotyczy ona zagadnień nietrywialnych, których rozwiązanie oprócz biegłości rachunkowej wymaga dużej intuicji fizycznej, a hamiltonian otrzymany przez zastosowanie ciągłej transformacji kanonicznej może być pomocny przy przewidywaniu nowych zaskakujących zjawisk.

Do wysokiej oceny treści badawczej rozprawy wypada dołączyć ocenę jej strony redakcyjnej. Rozprawa została wyjątkowo starannie zredagowana i napisana poprawnym językiem. Zamieszczone wykresy są czytelne, mają odpowiednią wielkość i zostały jasno opisane. Tym niemniej stwierdzam, że przy pisaniu rozprawy nie udało się uniknąć pewnych błędów redakcyjnych, które wskazuję poniżej.

Lista zauważonych nieścisłości i błędów redakcyjnych:

- Brak w rozprawie odniesienia do Rys. 3.7-3.12, a także Rys. 3.17.
- Opis Rys. 3.17: jest „w funkcja parowania” powinno być „w funkcji parowania”, a także niepoprawnie zapisany indeks potencjału U_d .
- Str. 19: Początek akapitu - jest „Głęboko z ”, powinno być „Głęboko w”.
- Str. 24: Przedostatni wiersz – brak prawego nawiasu w średniej χ_d . Dodatkowy prawy choć inny nawias znajduje się w równaniu (4.7).
- Str. 49: Wzór (3.67) - brak definicji zastosowanej jednocząstkowej funkcji Greena, która jest podana dopiero w równaniu (4.57). Ponieważ użyty w równaniu (4.57) symbol zmiennej czasowej τ oznacza czas urojony, zgodnie z opisem równania (4.10), to transformata Fouriera zarówno (4.57) jak i (3.67) jest funkcją urojonej częstości co jest jawnie reprezentowane w równaniach (4.18), (4.19) i (4.58). W równaniu (3.81), a także równaniach (B.6) i (B.7) Dodatku B zastosowano inną notację, w której argument ω jest zmienną urojoną. Tak wnioskuję na podstawie wzorów (3.85) i (B.8), w których symbol „ $\omega + i0^{+}$ ” najprawdopodobniej informuje z której części płaszczyzny zespolonej następuje przedłużenie analityczne funkcji Greena-Matsubary z osi urojonej na oś rzeczywistą.
- Str. 53: 10 wiersz tekstu – powinno być „tej zagadkowej tendencji”.
- Str. 54: 9 wiersz tekstu – jest „transformacje”, powinno być „transformację”.
- Str. 54: 3 wiersz od dołu – jest „ekperymentalne”, powinno być „eksperymentalne”.
- Str. 55: Pierwszy wiersz – jest „układów”, powinno być „układach”.
- Str. 66: Równanie (4.54) – niezgodność indeksów p , p' i k , k' po lewej i prawej stronie równania.
- Bibliografia: pozycja [54] – poprawna referencja to arXiv:1402.1291(2014).

Podsumowując pragnę jeszcze raz podkreślić bardzo wysoką ocenę przedstawionej rozprawy, postawionych w niej problemów, sposobu ich rozwiązania, otrzymanych wyników i ich interpretacji. Rozprawa spełnia ustawowe warunki stawiane rozprawom doktorskim w ustawie z dnia 14 marca 2003 r. z późniejszymi zmianami o *stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki*. Wnoszę o jej przyjęcie i dopuszczenie pani mgr Magdaleny Barańskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Jednocześnie, biorąc pod uwagę bogaty dorobek naukowy Doktorantki i wysoką wartość naukową prac będących podstawą rozprawy, zwracam się do Rady Wydziału Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie z wnioskiem o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr Magdaleny Barańskiej.

A handwritten signature in blue ink, reading "Grzegorz Harań".

dr hab. inż. Grzegorz Harań