

Prof. dr hab. Marcin Mierzejewski
Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski w Katowicach

Recenzja rozprawy doktorskiej
mgr Magdaleny Barańskiej
pt. *Analiza układów silnie skorelowanych w ujęciu ciągłej transformacji*
kanonicznej

Rozprawa doktorska Pani mgr Magdaleny Barańskiej zawiera rozwiązania dwóch ciekawych i istotnych problemów badawczych związanych z fizyką nadprzewodników oraz z silnymi korelacjami elektronowymi. Pierwszy z problemów dotyczy efektu Kondo w modelu domieszki Andersona połączonej jednocześnie z metaliczną i nadprzewodzącą elektrodą. Drugi problem polega na wyjaśnieniu, co jest przyczyną diamagnetycznej odpowiedzi miedzanów, która została zaobserwowana w temperaturach przekraczających temperaturę przejścia do stanu nadprzewodzącego. Ze względu na obecność silnych oddziaływań wielociałowych, rozwiązanie każdego z tych problemów wymagało przeprowadzenia obliczeń poza standardowym formalizmem perturbacyjnym. Wspólnym mianownikiem prezentowanych badań jest zastosowana metoda ciągłej transformacji kanonicznej. Rozprawa Pani mgr Magdaleny Barańskiej w elegancki sposób demonstrowa wszechstronność tej metody oraz jej wysoką użyteczność w badaniach dotyczących nieperturbacyjnych zagadnień w fizyce ciała stałego. W mojej ocenie, rozprawa doktorska zredagowana jest w sposób bardzo przejrzysty i staranny dzięki czemu jest nie tylko źródłem cennych wyników naukowych lecz także bardzo wartościowym, spójnym opisem samej metody badawczej. Po przeczytaniu rozprawy w pełni podzielam zdanie Autorki, że ciągła transformacja może być bardzo rozsądną alternatywą lub przynajmniej bardzo istotnym uzupełnieniem dla dominujących obecnie metod numerycznych, które często są źródłem wiarygodnych wyników, lecz znacznie rzadziej wskazują na istotne mechanizmy fizyczne, które za nimi stoją. Wyniki omawiane w rozprawie doktorskiej zostały w większości opublikowane w ośmiu artykułach, których Pani mgr Magdalena Barańska jest współautorką. Wśród nich występują publikacje w czasopiśmie tej rangi co *Physical Review B* czy *Scientific Reports*. Wyniki te były także prezentowane na ośmiu krajowych i zagranicznych konferencjach.

Rozprawę rozpoczyna krótki wstęp, w którym Autorka wyjaśnia przede wszystkim znaczenie podjętej tematyki badawczej. Kolejny rozdział zawiera ogólną dyskusję ciągłej

transformacji kanonicznej, przy czym szczegóły techniczne dotyczące wyboru generatora tej transformacji zostały zaprezentowane w dodatku A. Kolejne dwa stosunkowo obszerne rozdziały zawierają oryginalne wyniki naukowe. Każdy z nich poprzedzony jest dodatkowym wprowadzeniem, w którym omówiony jest obecny stan wiedzy o badanych zjawiskach oraz precyzyjnie określony jest problem badawczy. Każdy z tych rozdziałów kończy indywidualne podsumowanie. Ostatnim rozdziałem rozprawy jest ogólne podsumowanie, w którym Autorka sugeruje możliwe kierunki dalszych badań z wykorzystaniem ciągłej transformacji kanonicznej.

Problem badawczy analizowany w rozdziale trzecim dotyczy efektu Kondo w domieszce Andersona, która jest sprzężona jednocześnie z metalicznym elektrodą oraz z makroskopowym nadprzewodnikiem. Bliskość elektrody nadprzewodzącej powoduje, że pary Coopera występują również w domieszce. Intuicyjnie oczekujemy, że mechanizm ten powinien konkurować z oddziaływaniem wymiennym typu *spin flip* pomiędzy spinem elektronu na domieszce a elektronami przewodnictwa. W efekcie oczekivalibyśmy, że wzrost sprzężenia pomiędzy domieszką a nadprzewodnikiem będzie prowadził do obniżenia temperatury Kondo. Wyniki uzyskane przy zastosowaniu numerycznej grupy renormalizacji pokazują, że w pewnych reżimach takie rozumowanie jest zbyt uproszczone, a sprzężenie z nadprzewodzącą elektrodą może powodować zwiększenie temperatury Kondo. Wyjaśnienie tego efektu jest jednym z dwóch najważniejszych wyników rozprawy doktorskiej Pani mgr Magdaleny Barańskiej. Autorka analizuje model domieszki Andersona poszerzony o wyraz parujący, którego źródłem jest silne sprzężenie z nadprzewodnikiem (wzór 3.3). Uzasadnienie takiej postaci Hamiltonianu zostało zaprezentowane w dodatku B.

Hybrydyzacja pomiędzy stanami domieszki oraz stanami metalicznej elektrody jest eliminowana poprzez zastosowanie ciągłej transformacji unitarnej. Autorka pokazuje, że przy braku wyrazu parującego uzyskane wyniki odtwarzają rezultaty opublikowane wcześniej dla układu kropki kwantowej i metalicznej elektrody. Wyraz parujący prowadzi jednak do pojawienia się lub modyfikacji szeregu wyrazów w efektywnym, zrenormalizowanym hamiltonianie. Jeden z nowych wyrazów, oznaczony symbolem V_2 , ma szczególnie istotne znaczenie dla dalszych obliczeń, gdyż z powodu jego obecności konieczne staje się zastosowanie przybliżenia. Wybór odpowiedniego przybliżenia nie jest jednak oczywisty. Autorka analizuje dwie możliwości, określone równaniami (3.22) oraz (3.23) nazwane odpowiednio przybliżeniami Hartree-Focka oraz Hartree-Focka-Bogoliubova. W pierwszym przypadku V_2 redukowany jest do postaci opisującej nielocalne parowanie zrenormalizowanych stanów domieszki i metalicznej elektrody. Jak czytamy na stronie 24, wyraz ten został zaniedbany. Nie jest dla mnie oczywiste, czy efektem przybliżenia (3.22) jest zatem zaniedbanie wyrazu V_2 oraz czy zaniedbanie tego egzotycznego parowania jest dobrze uzasadnione. Oczekiwałbym, że tworzenie takich egzotycznych par Coopera może mieć istotny wpływ na efekt Kondo, choć przypuszczenie to jest poparte jedynie intuicją. Uważam, że warto przedyskutować te problemy w trakcie publicznej obrony.

Przybliżenie Hartree-Focka-Bogoliubova sprowadza wyraz V_2 do postaci opisującej hybrydyzację pomiędzy stanami domieszki a metalicznej elektrody. Nadprzewodząca elektroda może prowadzić do wzrostu temperatury Kondo jedynie w przypadku gdy zastosowane zostało przybliżenie Hartree-Focka-Bogoliubova, co pokazano na rysunku 3.16. Stosując przybliżenie Hartree-Focka stwierdzono, że nadprzewodząca elektroda prowadzi zawsze do obniżenia temperatury Kondo. Tym samym, jedynie przybliżenie Hartree-Focka-Bogoliubova odtwarza jakościowo wyniki numerycznej grupy renormalizacji dotyczące zwiększenia temperatury Kondo. Jak pokazano w rozprawie, wzrostu tego można oczekiwać także na podstawie wyników uzyskanych dzięki zastosowaniu transformacji Schrieffer-Wolffa do hamiltonianu (3.4).

W mojej ocenie, rysunek 3.15 oraz wyprowadzone równania 3.32, 3.36 oraz 3.61 są najważniejszymi wynikami prezentowanymi w rozdziale trzecim. Pokazują one, że odpowiednie połączenie obliczeń analitycznych i numerycznych jest najbardziej efektywnym podejściem, które umożliwia wyjaśnienie złożonych problemów występujących w układach silnie skorelowanych elektronów. Przybliżone obliczenia analityczne pozwalają wyodrębnić istotne mechanizmy fizyczne, podczas gdy obliczenia numeryczne pozwalają ocenić poprawność stosowanych przybliżeń.

Drugi, główny wynik rozprawy został zaprezentowany w rozdziale czwartym, w którym Autorka bada odpowiedź magnetyczną nadprzewodnika opisywanego modelem bozonowo-fermionowym z anizotropowym parowaniem typu d. Ta część rozprawy oparta jest w znacznej mierze na publikacji w *Physical Review B*, której pierwszym autorem jest Pani mgr Magdalena Barańska. Model bozonowy-fermionowy był wcześniej badany przy pomocy ciągłej transformacji kanonicznej przez promotora, Prof. dr hab. Tadeusza Domańskiego, jednak badania te koncentrowały się przede wszystkim na własnościach jednocząstkowych, które można było powiązać z otwieraniem się tzw. pseudoszczeliny. Aby wyznaczyć liniową odpowiedź układu na zewnątrz pole magnetyczne mgr Magdalena Barańska badała wielociałową funkcję korelacyjną typu prąd-prąd. Wyznaczenie zrenormalizowanych operatorów prądu poza przybliżeniem średniego pola jest wysoce nietrywialne i wymaga wprowadzenia przybliżeń, opisanych równaniami 4.53 i 4.54. Przybliżenie 4.54 jest podobne do przybliżenia Hartree-Focka stosowanego we wcześniejszym rozdziale rozprawy, więc wzór ten można byłoby uzupełnić o anomalne średnie, które występowały wcześniej w przybliżeniu Hartree-Focka-Bogoliubova. Tego typu rozszerzenie nie będzie miało wpływu na najważniejszy wniosek, który dotyczy bardzo wyraźnej diamagnetycznej odpowiedzi układu w fazie pseudoszczeliny. Jednak nie jest dla mnie oczywiste, czy te wyrazy mogłyby mieć znaczenie w fazie nadprzewodzącej, szczególnie w niskich temperaturach, gdzie wyniki numeryczne pokazują całkowite wysycenie składowej nadciekłej.

Wyjaśnienie diamagnetycznej odpowiedzi obserwowanej w miedzianach w fazie pseudoszczeliny wnosi istotny wkład w dyskusję dotyczącą pochodzenia tej fazy. Jest niezwykle istotne aby zrozumieć konsekwencje wynikające z obecności niekoherentnych par elektronów.

Moja jedyna uwaga krytyczna dotyczy zbyt skromnej liczby wyników numerycznych prezentowanych w tym rozdziale. Szkoda, że najważniejszy wynik został przedstawiony na rysunku 4.4 tylko dla jednego zestawu parametrów modelu bosonowo-fermionowego.

Praca jest starannie zredagowana. Dostrzegłem jedynie nieliczne problemy techniczne, które nie utrudniają czytania rozprawy, więc nie będę ich wymieniał.

W podsumowaniu stwierdzam, że przedstawiona mi do recenzji rozprawa doktorska Pani mgr Magdaleny Barańskiej spełnia wszystkie zwyczajowe i ustawowe wymogi stawiane pracom doktorskim i wnioskuję do Rady Wydziału Matematyki, Fizyki i Informatyki UMCS w Lublinie o dopuszczenie mgr Magdaleny Barańskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Ponadto uważam, że w rozprawie zaprezentowano bardzo spójne i, przede wszystkim, bardzo eleganckie rozwiązania dwóch istotnych problemów naukowych dotyczących silnie skorelowanych układów elektronowych. Z tego powodu wnioskuję także o wyróżnienie rozprawy doktorskiej Pani mgr Magdaleny Barańskiej.

Marcin Mierzejewski