

prof. dr hab. Tomasz Kostyrko
Wydział Fizyki UAM

Poznań, 22 kwietnia 2022

**Ocena rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego doktora
Marcina M. Wysokińskiego w związku z postępowaniem o nadanie Mu
stopnia doktora habilitowanego nauk fizycznych**

Dr Marcin Wysokiński uzyskał tytuł magistra na Uniwersytecie Jagiellońskim w 2011 r. na podstawie rozprawy pt.: "Properties of the liquid Helium 3 as a correlated quantum liquid", a stopień doktora na podstawie rozprawy: "Unconventional superconductivity and hybridized correlated fermion systems", obronionej także na UJ w 2015 r. Jego promotorem w obu przypadkach był prof. dr hab. Józef Spałek.

Formalny opis pracy habilitacyjnej.

Jako swoje osiągnięcie naukowe, podlegające ocenie w związku z Ustawą o stopniach i tytule naukowym¹ dr Wysokiński wskazał, zgodnie z jej Art.16.2, jednotematyczny cykl 7 prac P1-P7 opublikowanych w latach 2016-2021, pod tytułem: "Fazy i przemiany fazowe w równowagowych i nierównowagowych układach skorelowanych fermionów". Jedna z prac cyklu opublikowana została w czasopiśmie Scientific Reports, a pozostałe w Physical Review B. Czasopisma te posiadają wysoki czynnik wpływu i wysoką punktację MEiN: 140p.

Dwie z prac cyklu (P1,P3) są samodzielnymi pracami Habilitanta, jedna (P2) jest wspólną pracą trzech autorów, a pozostałe (P4-P7) są pracami dwuautorskimi. Prof. Michele Fabrizio, zgodnie z jego oświadczeniem, był inicjatorem projektu realizowanego w pracach P4-P6, współuczestniczył w interpretacji wyników i redakcji pracy, a całkowicie samodzielnym wkładem dr. Wysokińskiego było wykonanie obliczeń analitycznych i numerycznych, był on także głównym autorem tekstu publikacji i interpretacji wyników. Pan dr. Marcin Płodzień w pracy P7 zaproponował zbadanie modelu kilku oddziaływujących fermionów w pułapce harmoniczej i wykonał do tej części pracy obliczenia numeryczne, jest też współautorem koncepcji całości pracy i redakcji artykułu, a swój całkowity udział określił na 50%. Pan dr Wysokiński był głównym autorem części pracy P7 odnoszącej się do izolatora Motta i dimeru Hubbarda. Udział współautorów pracy P2, Giuseppe Cuono i Carmino Autieri, w powstaniu tej publikacji polegał na wykonaniu obliczeń DFT, interpretacji rezultatów i napisaniu części pracy opisującej wyniki DFT. Dr Wysokiński zaproponował dla tej pracy temat badawczy i dokonał analizy prostego modelu do interpretacji

¹dalej krótko określaną jako Ustawa

wyników DFT, był też współautorem tekstu pracy poza jej częścią odnoszącą się do wyników DFT. Z dostarczonych oświadczeń wynika zatem, że w pracach współautorskich P4-P7 dr Wysokiński pełnił główną rolę, w pracy P7 jego udział był równy udziałowi drugiego autora, a do pracy P2 główny wkład wnieśli jej współautorzy. Pozwala to stwierdzić, że zgodnie z wymogami Ustawy udział dr Wysokińskiego w powstaniu cyklu publikacji P1-P7 został wyraźnie określony i w całości dzieła jest on zdecydowanie dominujący.

Tematyka cyklu prac P1-P7 obejmuje badanie modeli teoretycznych fazy skondensowanej, odnoszące się do układów wąskopasmowych, przede wszystkim związków metali przejściowych. W układach tych korelacje elektronowe odgrywają zasadniczą rolę w stabilizacji faz uporządkowanych magnetycznie lub w realizacji przejścia izolator-metal. użytymi w pracach modelami były przede wszystkim periodyczny model Andersona i model Hubbarda. Oprócz badania rozwiązań tych modeli w stanie równowagi, w pracach P6,P7 przeprowadzono też analizę ich własności dynamicznych, uwzględniając czasową zmienność parametru oddziaływania. O ile badania problemu wpływu korelacji elektronowych na wspomniane własności równowagowe ma już bardzo długą historię, badania dynamiki są prowadzone od stosunkowo niedawna a uzyskane w tej analizie wyniki mogą mieć znaczenie dla opisu zachowania ultrazimnych atomów na sieciach optycznych, objaśnienia danych uzyskanych z czasowo rozdzielczej spektroskopii czy ujawnienia faz metastabilnych. W większości prac (poza P2) analizę ilościową oparto przede wszystkim na metodzie wariacyjnej Gutzwillera, zarówno w jej najprostszej wersji (tzw. przybliżenia Gutzwillera), jak i przy użyciu podejścia diagramowego. Podsumowując zatem formalny opis cyklu habilitacyjnego stwierdzam, że ze względu na jego spójność tematyczną spełnia on wymagania Ustawy.

Dyskusja wyników uzyskanych w pracy habilitacyjnej.

Praca P1, przedstawia ogólny opis indukowanych ciśnieniem przejść między fazami magnetycznymi F,AF w układach binarnych i trójskładnikowych metali 3d (zwłaszcza LaCrGe₃) opisanych ogólnie za pomocą dość prostego modelu p-d, gdzie oddziaływania elektron-elektron uwzględnione zostały jawnie tylko na orbitalach 3d. Model jest ogólniejszy niż model Andersona przez włączenie w nim, obok hybrydyzacji p-d, także bezpośrednich przeskoków między orbitalami 3d TM (co jest zgodne z jego budową przestrzenną LaCrGe₃). Autor określa mechanizm przejść między fazami magnetycznie uporządkowanymi jako 2-kanałowy mechanizm Stonera, przez co rozumie, że zachowanie modelu może być kontrolowane za pomocą współzawodnictwa parametrów oddziaływania i hybrydyzacji (kanał 1) lub oddziaływania i całki przeskoku między orbitalami 3d. Model badany był za pomocą metody wariacyjnej

i przybliżenia Gutzwillera, które należy do metod średniego pola, ale jest dobrze uzasadnione do uwzględnienia silnych oddziaływań e-e, o ile nie znajdujemy się zbyt blisko zakresu Kondo lub przejścia I-M. Praca zawiera wnikliwą analizę możliwych przejść fazowych indukowanych ciśnieniem w metalicznych układach magnetycznych, którego efekty uwzględniane są w modelu za pomocą modyfikacji parametrów przeskoków, hybrydyzacji oraz położenia poziomu 3d.

Praca P2 składa się z 2 części. W pierwszej zastosowano metodę DFT do zbadania struktury elektronowej wędrownego ferro magnetyka $\text{La}_5\text{Co}_2\text{Ge}_3$ poddanego ciśnieniu. Stwierdzono, że dwa nierównoważne krystalograficznie jony Co (Co_1, Co_2) ewoluują w różny sposób z ciśnieniem. Moment magnetyczny Co_1 powoli maleje z ciśnieniem, podczas gdy Co_2 szybko maleje prawie do zera, gdy ciśnienie przekracza pewną wartość progową. Zostało to zinterpretowane jako zjawisko cross-overu, w przeciwieństwie do przejścia fazowego. W drugiej części pracy (za którą głównie odpowiada Habilitant) zaproponowano prosty model 1D metalu, w którym magnetyzacja jest wymuszona naprzemiennie zmiennym polem zewnętrznym. Zmiany ciśnienia lub temperatury miały tu być odzwierciedlone przez odpowiednie zmiany wartości pól na nierównoważnych krystalograficznie węzłach. Pokazano, że zmiana pola wymuszająca znikanie momentu na jednym z węzłów prowadzi do cross-overu w przewodności elektrycznej, wyznaczonej za pomocą teorii Landauera. Model ten jakościowo tłumaczy zmiany obserwowalne w doświadczeniu. Mimo, że model nie ma bezpośredniego powiązania z wynikami badań struktury elektronowej, można oczekiwać - choć w tej pracy tego nie potwierdzono - że pewne uogólnienie modelu z pracy P1 może dawać podobne wyniki.

W pracy P3 zaproponowano model do opisu magnetyzmu w związku USb_2 oraz przejść między fazami magnetycznie uporządkowanymi pod wpływem ciśnienia hydrostatycznego. W układzie wyróżniono trzy podukłady atomów U, ze względu na nierównoważność otoczeń krystalograficznych, która prowadziła do różnego położenia środka ciężkości pasm elektronów wędrownych pochodzących od atomów Sb. Hamiltonian w każdym z podukładów miał postać modelu Andersona. Analizę modelu przeprowadzono za pomocą przybliżenia Gutzwillera. Założono przy tym, że zajęcie pasma odbiega od półpełnego, gdzie przybliżenie to jest niewystarczające, ze względu na pominięcie korelacji typu Kondo. Efekt ciśnienia modelowano za pomocą zmiany parametrów hybrydyzacji i położenia pasm. Pokazano, że nierównoważność energetyczna atomów U wyjaśnia nietypowe uporządkowanie AF: $\uparrow\downarrow\uparrow$, a wzrost ciśnienia prowadzi do przejścia od uporządkowania AF do F. Przeprowadzono dyskusję stosowalności modelu dla szeregu związków metalicznych U.

Praca P4 odnosi się do tzw. topologicznych izolatorów Kondo, charakteryzu-

jących się obecnością pośredniej szczeliny w widmie wzbudzeń (przykład: SmB6 - sześcioborek samaru), związanej z rolą sprzężenia spin-orbita. Do opisu struktury elektronowej zastosowano tu model Andersona na sieci kwadratowej, z założeniem że przekrycie stanów zlokalizowanych najbliższych atomów z grupy 4f jest zaniedbywalnie małe (poniżej tzw. granicy Hilla). Hybrydyzację pomiędzy stanami zlokalizowanymi (typu f), a stanami elektronów przewodnictwa, potraktowano jako zależną od spinu. Analizę struktury elektronowej modelu przeprowadzono za pomocą metody diagramowej z zastosowaniem falowej funkcji Gutzwillera jako funkcji wariacyjnej. W podejściu tym kwantowe wartości oczekiwane operatorów przedstawia się za pomocą rozwinięcia w szereg zawierający w kolejnych rzędach wyrazy z korelacjami wyższych rzędów. Autorzy pokazali (zob. Suplement tej pracy), że wystarczające do osiągnięcia zbieżności jest ograniczenie się do 4 stopnia rozwinięcia. W ramach tego podejścia otrzymuje się efektywny Hamiltonian jednocząstkowy, którego struktura elektronowa odzwierciedla własności topologiczne układu i jest używana do wyznaczenia jego niezmienników topologicznych. W wyniku obliczeń okazało się, że procedura wariacyjna generuje w Hamiltonianie efektywnym wyrazy opisujące przeskoکی elektronów między stanami zlokalizowanymi, mimo ich braku w wyjściowym modelu. Jednocześnie ujawnia się występowanie w strukturze elektronowej pośredniej szczeliny elektronowej, powiązanej z wartością i znakiem efektywnych parametrów przeskoکی. Jest to istotny postęp wobec wcześniejszych prac innych autorów, którzy uzyskiwali występowanie szczeliny pośredniej za pomocą wprowadzenia *ad hoc* bezpośrednich przeskoکی między stanami zlokalizowanymi, a co nie jest dobrze uzasadnione w układach poniżej granicy Hilla.

W pracy P5 przedstawiono nowe podejście wariacyjne do modelu Hubbarda w granicy silnych korelacji (na sieci Bethe) dla przypadku półpełnego pasma. Metoda polega na zastosowaniu metody wariacyjnej Gutzwillera wraz z transformacją kanoniczną Schrieffer-Wolfa. Nowością jest tu użycie parametru rozwinięcia transformacji, jako dodatkowego parametru wariacyjnego, podczas gdy w zwykłym podejściu perturbacyjnym operator definiujący transformację jest wyliczany iteracyjnie i zależy wyłącznie od struktury modelu. Obliczenia wykonano uwzględniając korelacje kolejnych rzędów w rozwinięciu funkcji wariacyjnej Gutzwillera, kontrolując zbieżność wyników względem rzędu rozwinięcia. Wykonując rozwinięcie transformacji z dokładnością do 3. rzędu względem parametru małości otrzymano dość prosty analityczny wynik na energię wariacyjną. Znalaziono jej optymalną wartość i porównano ją (osobno dla przyczynków kinetycznego i potencjalnego) z wynikiem otrzymanym za pomocą DMFA innych autorów, uzyskując bardzo dobrą ich zgodność. Znalaziono również wartość krytyczną oddziaływania kulombowskiego, dla której w układzie za-

chodzi przejście izolator-metal (z warunku analogicznego do znanego z przybliżenia Gutzwillera). Otrzymano również wynik analityczny dla funkcji podwójnej obsady węzłów (d) oraz podatności paramagnetycznej Pauliego w obecności jednorodnego pola. Pokazano, że wyniki te stanowią znaczne ulepszenie rezultatu otrzymanego w przybliżeniu Gutzwillera (zerowy rząd rozwinięcia funkcji wariacyjnej Gutzwillera), a metoda stanowi bardzo użyteczną alternatywę wobec dość pracochłonnego podejścia DMFA.

W pracy P6 zbadano dynamiczne zachowanie modelu Hubbarda dla półpełnego pasma na sieci Bethego, z oddziaływaniem zależnym od czasu, dla przypadku nagłego włączania oddziaływania kulombowskiego. Obliczenia przeprowadzono za pomocą metody wariacyjnej Gutzwillera połączonej z transformacją Schrieffer-Wolfa, zależną od czasu. Zależność czasową parametrów metody określono metodą punktu siodłowego z funkcyjonału działania, wykonując obliczenia z dokładnością do 3. rzędu względem parametru rozwinięcia transformacji i rozwijając funkcję Gutzwillera w szereg względem rzędu korelacji. Otrzymano w ten sposób układ równań Eulera-Lagrange'a na parametry wariacyjne metody Gutzwillera oraz transformacji Schrieffer-Wolfa. Wyznaczono czasowe zależności dla funkcji podwójnej obsady węzłów i tzw. składnika kwazicząstkowego R , pełniącego w metodzie Gutzwillera funkcję parametru porządku opisującego przejście izolator-metal. Badanie czasowej zależności podwójnej obsady węzłów ujawniła kilka anomalii czasowych w zależności od siły włączanego oddziaływania. Pierwszą z nich powiązano z punktem dynamicznego przejścia izolator-metal i pokazano, że towarzyszy jej mięknięcie jednego z modów, wyodrębnionych przy analizie fourierowskiej parametru porządku. Mniej wyraźne anomalie powiązano ze zwyrodnieniem tych modów oraz ze zmianą typu korelacji magnetycznych w układzie.

W pracy P7 rozpatruje się modele elektronów z zależnym od czasu oddziaływaniem. Szczegółowo analizowane są dwa proste przypadki: dwuelektronowy dimer Hubbarda oraz układ czterech elektronów w pułapce harmoniczej z oddziaływaniem kontaktowym (typu delta-Diraca). Dimer Hubbarda z periodycznie zmiennym oddziaływaniem przyjmuje podobną postać, jak model Rabiego (model Dickiego z pojedynczym układem 2-poziomowym). Wyliczono w tym przypadku absorpcję energii, rozwiązując zależne od czasu równanie Schroedingera. Okazało się, że absorpcja ma charakter rezonansowy dla częstości równym podwielokrotnościom najniższej energii wzbudzenia dimeru, przy czym kolejne maksima odpowiadały wielofotonowym procesom absorpcji. Dla układu elektronów w pułapce harmoniczej wykonano podobną analizę, obliczając tzw. echo Lochschmidta i odwrotny współczynnik udziału. Pokazano różnicę zachowania tych charakterystyk w warunkach

rezonansu i poza rezonansem.

Ocena pracy habilitacyjnej: podsumowanie.

Osiągnięcia uzyskane w omawianym cyklu prac P1-P7 oceniam bardzo wysoko. Wszystkie te prace cechuje wysoki poziom ścisłości podejścia i wnikliwość dyskusji uzyskanych wyników analitycznych i numerycznych. Artykuły napisane są przejrzysto i logicznie, co przekonuje o poprawności otrzymanych rezultatów, a tam gdzie to potrzebne są uzupełnione o odpowiednie dodatki, dobrze ułatwiające zrozumienie subtelności technicznych użytych metod. Spośród szeregu istotnych, wymienionych wyżej rezultatów, na szczególne podkreślenie moim zdaniem zasługują nowe wyniki dotyczące przejścia izolator-metal w modelu Hubbarda na sieci Bethego, w pracy P5. W pracy tej dr Wysokiński udało się nie tylko uzyskać omówione wyżej wzory analityczne na energię i niektóre inne charakterystyki stanu podstawowego, ale i pokazać świetną ich zgodność ze znacznie bardziej pod względem numerycznym pracochłonną metodą DMFA. Wyniki tego podejścia uogólnione w pracy P6 na przypadek czasowo zależnego Hamiltonianu mają duże szanse znaleźć szerokie zastosowanie do analizy zjawisk nierównowagowych, w tym opisu zachowania ultrazimnych atomów w intensywnie ostatnio badanych sieciach optycznych czy eksperymentów z rozdzielczością czasową. Z kolei w monoautorskich pracach P1,P3 Habilitant wykazał się dużą umiejętnością analizy sytuacji eksperymentalnej badanych związków przedstawiając teorię, dającą spójny opis uporządkowań magnetycznych w szerokiej klasie układów metali przejściowych. W podsumowaniu mojej oceny cyklu prac P1-P6 z pełnym przekonaniem mogę stwierdzić, że wyniki tam przedstawione stanowią istotny wkład w rozwój fizyki, a w szczególności mają duże znaczenie dla rozwoju wiedzy o tych układach fazy skondensowanej, w których korelacje elektronowe określają własności układu.

Ocena całkowitego dorobku naukowego Habilitanta.

Dr Wysokiński jest w sumie wyłącznym autorem lub współautorem 20 publikacji naukowych w czasopismach z listy ISI, z których 10 opublikował przed uzyskaniem przez niego stopnia doktora. Publikacje te uzyskały łącznie 147 cytowań (bez autocytaowań) oraz indeks $h=9$. Biorąc pod uwagę krótki, tj. 10-letni, okres jaki upłynął od ukończenia przez niego studiów magisterskich, jest to bardzo dobry wynik. Należy przy tym zwrócić uwagę na fakt, że zdecydowana większość tych publikacji (13) posiada czynnik wpływu powyżej 3.5, zostały zatem opublikowane w czasopismach o dużym prestiżu naukowym, głównie w Physical Review B. Ponadto, w 3/4 swoich publikacji Habilitant był pierwszym lub jedynym (w 4 pracach) autorem, co podkreśla jego samodzielność i dojrzałość naukową. Niemała część tych publikacji, jak wyżej wspomniano, powstała w ramach współpracy z uczonymi z zagranicy. Przed

doktoratem Habilitant odbył dwa krótkoterminowe staże w Institute of Science and Technology Austria in Klosterneuburg, po doktoracie przez dwa lata prowadził badania w grupie prof. Michele Fabrizio at the International School for Advanced Studies (SISSA) w Trieście, we Włoszech.

Po doktoracie dr Wysokiński oprócz prac P1-P7 opublikował jeszcze trzy artykuły naukowe. W pracach tych badał: niekonwencjonalne nadprzewodnictwo za pomocą rozszerzenia modelu Hubbarda stosując diagramowe podejście do metody Gutzwillera [8], własności topologiczne wielowarstw w materiałach typu SnTe domieszkowanych Pb [9] oraz nieabelową fazę Berry'ego układu dwóch dziur o spinie efektywnym $3/2$, zlokalizowanych w półprzewodniku i oddziałujących z polem elektromagnetycznym wygenerowanym we wnęce mikrofalowej [10]. Prace zostały opublikowane w czasopismach o dużym czynnikiem wpływu: Physical Review B [9,10], oraz w Journal of Physics: Condensed Matter [8].

Do osiągnięć naukowych Habilitanta należy jego wysoka aktywność konferencyjna. Po obronie pracy doktorskiej wygłosił 5 referatów na zaproszenie na konferencjach krajowych (2) i zagranicznych (3). Poza tym miał 5 innych wystąpień przed i tyle samo po otrzymaniu stopnia doktora, przedstawił też kilka plakatów konferencyjnych. Habilitant wykazał też znaczną aktywność jako recenzent w szeregu czasopism naukowych, w tym Phys. Rev. Lett. i Phys. Rev. B.

Ocena dorobku dydaktycznego Habilitanta.

Dr Wysokiński posiada także zauważalny dorobek dydaktyczny. W Instytucie Fizyki PAN prowadził przez 2 lata 30-godzinny wykład monograficzny dla doktorantów z zakresu fizyki fazy skondensowanej. Jako doktorant na Uniwersytecie Jagiellońskim prowadził ćwiczenia z fizyki, zajęcia w pracowni fizycznej, a także przygotowywał do olimpiady fizycznej uczniów liceów.

Podsumowanie i wniosek końcowy.

Podsumowując omówione osiągnięcia Habilitanta jestem zdecydowanie przekonany, że wysoka wartość zawartego w cyklu prac P1-P7 osiągnięcia habilitacyjnego, a także całkowity dorobek naukowy i dydaktyczny dr. Marcina Wysokińskiego spełniają warunki określone przez Ustawę o tytule i stopniach naukowych oraz wnoszę o dopuszczenie Kandydata do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

prof. dr hab. Tomasz Kostyrko

