



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA  
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

## Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii AGH

Kraków, 30.06.2022

dr hab. inż. Michał Zegrodnik, prof. AGH  
Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii  
Akademii Górniczo-Hutniczej im. St. Staszica w Krakowie

**Recenzja osiągnięcia naukowego pt. „Właściwości orbitalno-selektywnej fazy Motta w niskowymiarowych systemach wielopasmowych”**

**oraz**

**ocena aktywności naukowej dr Jacka Herbrycha w związku z wszczęciem postępowania habilitacyjnego**

### **1) Sylwetka kandydata**

Pan dr Jacek Herbrych ukończył studia magisterskie w 2010 roku na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Łódzkiego, uzyskując tytuł magistra fizyki. Następnie rozpoczął pracę na stanowisku „Young researcher” na Wydziale Fizyki Teoretycznej Instytutu Jožefa Stefana w Lublanie (Słowenia). Trzy lata później obronił pracę doktorską na Wydziale Matematyki i Fizyki Uniwersytetu w Lublanie (Słowenia) pt. „Finite-temperature dynamics of quantum spin chains” pod kierownictwem prof. dr Petera Prelovšeka. W latach 2014-2016 odbył staż podoktorski w grupie Prof. dr Xenophona Zatoza na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Kreteńskiego w Heraklion (Grecja) oraz jednocześnie był zatrudniony na stanowisku pracownika naukowego w Centre for Quantum Complexity and Nanotechnology w tym samym mieście. Drugi staż podoktorski Habilitant odbył w latach 2016-2019 w grupie Prof. Elbio

Dagotto na Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu Tennessee w Knoxville, USA. W tym samym czasie pracował na Wydziale Inżynierii Materiałowej i Technologii w Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, USA. Po powrocie do Polski Pan dr Jacek Herbrych został zatrudniony jako adiunkt na Wydziale Podstawowych problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej gdzie kieruje/kierował dwoma grantami badawczymi (OPUS 18 NCN oraz „Polskie Powroty” NAWA).

Jak widać z przedstawionej dokumentacji habilitant mimo stosunkowo młodego wieku ma bogate doświadczenie w pracy naukowej, które zdobywał w kilku dobrych ośrodkach badawczych zarówno zagranicznych oraz krajowych. Wyróżnić należy także szeroką współpracę z bardzo dobrymi specjalistami w dziedzinie o renomie międzynarodowej takimi jak np. Prof. Dr Elbio Dagotto, Prof. Dr Adriana Moreo, Prof. Dr Peter Prelovšek oraz inni. Zainteresowania badawcze Pana dr Herbrycha koncentrują się głównie wokół teoretycznego opisu układów silnie skorelowanych elektronów oraz transportu elektronowego w układach niskowymiarowych. W szczególności badania te są nakierowane na własności statyczne oraz dynamiczne układów wielo-orbitalnych z naciskiem na magnetyzm, oddziaływanie Hunda, czy orbitalno-selektywny stan izolatora Motta.

## **2) Ocena cyklu publikacji stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego**

Jako osiągnięcie naukowe habilitant przedstawił cykl 6 prac naukowych powiązanych tematycznie zatytułowany „Właściwości orbitalno-selektywnej fazy Motta w niskowymiarowych systemach wielopasmowych”. Prace wchodzące w skład cyklu opublikowano w bardzo dobrych czasopismach naukowych: 2 prace w Nature Communications, 1 praca w Physical Review Letters, 2 prace w Physical Review B, oraz 1 praca w Proceedings of National Academy of Sciences USA. W pięciu pracach Habilitant jest pierwszym autorem i szacuje swój wkład na 70%, a w jednej jest autorem ostatnim oraz szacuje swój wkład na 40%. Po zapoznaniu się z oświadczeniami habilitanta oraz współautorów można stwierdzić że rola dr Herbrycha w sporządzeniu pięciu wspomnianych prac naukowych jest dominująca a w przypadku pozostałej jednej pracy, znacząca.

Badania teoretyczne przeprowadzone w cyklu prac odnoszą się do wybranych związków na bazie żelaza, w których oddziaływanie elektron-elektron w znaczący sposób wpływa na fizykę układu. Ta okoliczność wymaga stosowania uproszczonych modeli efektywnych co spowodowane jest koniecznością uwzględniania odpychania Coulomba oraz oddziaływania

Hunda z odpowiednią dokładnością. Wspólnym celem publikacji wchodzących w skład osiągnięcia naukowego jest teoretyczna analiza magnetyzmu, orbitalno-selektywnej fazy Motta, oraz zjawisk transportu (zarówno spinu, jak i ładunku) w niskowymiarowych modelach wielopasmowych. W prowadzonych badaniach Autor posługiwał się metodą grupy renormalizacji macierzy gęstości (DMRG), która cechuje się wysoką dokładnością oraz jak najbardziej dobrze nadaje się do badania fizyki wspomnianych układów. Zagadnienie podjęte przez dr Hybrycha wpisuje się w nurt badań nad układami oddziałujących elektronów, w których ma miejsce współzawodnictwo pomiędzy ładunkowymi, orbitalnymi oraz spinowymi stopniami swobody. Jest to tematyka ciekawa oraz aktualna, a jednocześnie wymagająca zastosowania zaawansowanej metodologii z punktu widzenia opisu formalnego.

W autoreferacie dr Herbrych podzielił tematykę analizowaną w jego osiągnięciu naukowym na trzy części, które skrótowo omówię poniżej.

W części pierwszej uwaga skupiona jest na statycznych własnościach spinów w jednowymiarowych łańcuchach oraz kwazi-jednowymiarowych drabinach opisanych efektywnym dwu-orbitalnym modelem Hubbarda. Jak zostało pokazane w pracy H2, w tym pierwszym przypadku (łańcuchy) wspomniany model przejawia oznaki orbitalnie-selektywnego przejścia Motta. Ponadto może on zostać zmapowany na uogólniony model Kondo-Heisenberga co, ze względu na ograniczenie przestrzeni Hilberta, pozwala na szczegółową analizę własności magnetycznych układu dla stosunkowo szerokiego zakresu parametrów. Wyznaczając statyczny współczynnik struktury spinowej Autor przeanalizował magnetyczny diagram fazowy wspomnianego zmapowanego modelu. Jak pokazano dla słabych oddziaływań ( $U < W$ ) układ jest paramagnetycznym metalem, dla znaczących oddziaływań ( $U > W$ ) występuje przejście do orbitalnie-selektywnej fazy Motta. Dla wystarczająco dużych  $U$  występuje uporządkowanie ferromagnetyczne, natomiast dla  $U \sim W$  pojawia się magnetyzm blokowy. W szczególności w ramach tej części analizy odkryto nowe rodzaje bloków magnetycznych na trzech oraz czterech węzłach. Badania prowadzone w pracy H2 zostały rozszerzone w pracy H3 o bardziej szczegółową analizę obszaru diagramu fazowego, z niewspółmiernym porządkiem magnetycznym. W tym celu wyznaczono funkcje korelacji chiralności oraz korelację dimerową. Na podstawie przeprowadzonej analizy przedstawiono spójny obraz wyjaśniający charakterystykę stanu magnetycznego pomiędzy fazą blokową oraz fazą ferromagnetyczną. Mianowicie, jak pokazano w miarę zwiększania oddziaływań ( $U$ ) bloki ferromagnetyczne

zaczynają się obracać względem siebie tworząc stan blokowo-spiralny aż do momentu pełnego uporządkowania ferromagnetycznego dla dużych wartości parametru  $U$ . Co ciekawe, stan blokowo-spiralny został otrzymany w modelu bez żadnej frustracji, którą uważa się za standardowy czynnik stabilizujący tego typu uporządkowanie.

W kolejnym kroku prowadzone badania zostały rozszerzone o sytuację opisującą układ kwazi-jednowymiarowej wielopasmowej drabiny Hubbarda, która w bardziej realistyczny sposób reprezentuje związki z rodziny 123 na bazie żelaza. Również tutaj udało się wyznaczyć magnetyczny diagram fazowy oraz szczegółowo przeanalizować różnorodne uporządkowania magnetyczne w orbitalno-selektywnej fazie Motta, co zawarte jest w pracy H6. Wnioskiem z przeprowadzonej analizy jest, że materiały na bazie żelaza w geometrii drabin wykazują tendencje do magnetyzmu blokowego, który może pojawiać się w różnorodnych formach w zależności od domieszkowania oraz konkretnej wartości całki oddziaływań. Ponadto, wyznaczony diagram fazowy zawiera obszary stabilności fazy antyferromagnetycznej (podobnie jak w miedzianach) oraz obszar separacji faz (podobnie jak w manganitach).

W drugiej części autoreferatu omówione zostały badania dotyczące dynamicznych właściwości spinów. Ta część analizy zmotywowana jest literaturowymi danymi eksperymentalnymi zgodnie, z którymi w wybranych materiałach na bazie żelaza istnieją dwa mody (akustyczny oraz optyczny) rozdzielone przerwą energetyczną. W rozważaniach teoretycznych przeprowadzonych przez habilitanta posłużono się trójpasmowym modelem Hubbarda, dla którego udało się wyznaczyć numerycznie dynamiczny współczynnik struktury magnetycznej w fazie orbitalnie selektywnego izolatora Motta z magnetyzmem blokowym. Ważnym wynikiem tych badań (zawartych w pracy H1) było zidentyfikowanie dwóch typów wzbudzeń: niskoenergetycznego pasma dyspersyjnego (mod akustyczny) oraz wysokoenergetycznego pasma bez dyspersji (mod optyczny). Wynik ten wskazuje na podobieństwo obliczonych widm spinowych wybranego modelu do ich odpowiedników mierzonych za pomocą nieelastycznego rozpraszania neutronów dla wybranych chalcogenków żelaza. Ponadto, jak pokazano w pracy H1 za jakościowe cechy widma odpowiedzialne są elektrony zlokalizowane z orbitala  $\gamma=2$ . Szczegółowa analiza Lanczosa zamieszczona w tej samej pracy wskazuje, że główna różnica w energiach pomiędzy stanem podstawowym a modelem optycznym wynika z lokalnej wymiany Hunda.

Badanie dynamicznych właściwości spinów przeprowadzone zostały dodatkowo dla wcześniej wspomnianego uogólnionego modelu Kondo-Heisenberga, który umożliwia

przeskanowanie szerszego spektrum parametrów w bardziej szczegółowy sposób. W ramach tej części badań przeanalizowano jak ewoluuje dynamiczny współczynnik struktury na skutek zmian całki oddziaływania Coulomba,  $U$ , oraz oddziaływania Hunda,  $J_H$ . W szczególności w pracy H4 zbadano że dla  $U \sim W$  gdzie występuje faza z magnetyzmem blokowym własności spinowe w zakresie niskich energii są w większym stopniu zdeterminowane przez wzbudzenia wewnątrz bloków niż między blokami. Skolei w obszarze  $U \geq W$  gdzie obserwuje się formowanie modu optycznego ma miejsce zachowanie jakościowo przypominające typową zależność całki wymiany spinów w fazie Motta  $J \sim 1/U$ . Ponadto jak pokazano zachowanie modu optycznego jest w dużym stopniu zdeterminowane przez lokalne oddziaływanie Hunda co jest zgodne z wcześniejszą analizą przeprowadzoną w pracy H1.

Trzecia część opisu osiągnięcia naukowego skupia się na analizie korelacji elektronowych oraz transportu ładunku. W kontekście tego pierwszego zagadnienia wyznaczony został wpływ blokowego oraz blokowo-spiralnego porządku magnetycznego na jednocząstkową funkcję spektralną. Wyniki tych badań zaprezentowane zostały w pracy H3. W szczególności, dla fazy blokowej, przeprowadzone obliczenia wskazują na zachowanie podobne do tego jakie odpowiada otwieraniu się pseudoszczeliny. Wspomniana pseudoszczelina natomiast zamyka się dla fazy blokowo-spiralnej, w której z kolei dochodzi do utworzenia dwóch pasm co wynika z dwóch możliwych kierunków nawinięcia spiral magnetycznych. Jak wynika z przeprowadzonej analizy ogólna charakterystyka funkcji spektralnej wskazują na skomplikowane współzawodnictwo pomiędzy różnymi stopniami swobody oraz skalami energetycznymi co jest cechą charakterystyczną układów oddziałujących elektronów.

Powyższe rozważania przeprowadzono zarówno dla modelu Hubbarda jak i dla zmapowanego modelu Kondo-Heisenberga. Jak wynika z analizy porównawczej w reżimie znaczących oddziaływań elektron-elektron model zmapowany dobrze odzwierciedla fizykę modelu uogólnionego. Co ciekawe, wyniki przedstawione w pracy H3 wskazują na łamanie symetrii parzystości, co jest jednym z warunków na występowanie w układzie stanów Majorany dla zerowych energii. Ten fakt stał się motywacją do szczegółowej analizy przeprowadzonej w pracy H5, gdzie do rozważanego modelu Kondo-Heisenberga dodano wyraz odpowiedzialny za lokalną singletową amplitudę nadprzewodzącą. Jak zostało pokazane w takim przypadku w fazie blokowo-spiralnej poja się mod wewnątrz przerwy energetycznej na energii Fermiego, który stowarzyszyć można z występowaniem stanów Majorany na krawędziach układu (stan topologiczny). Dodatkowo obecności modu Majorany towarzyszy pojawienie się składowej

trypletowej do nadprzewodnictwa. Co ciekawe w rozważanym przez Habilitanta przypadku składniki potrzebne do podtrzymania modów Majorany występują jako konsekwencja efektów kwantowych indukowanych przez oddziaływanie elektron-elektron, a nie wynikają one z klasycznych momentów magnetycznych oraz oddziaływania spin-orbita jak to ma miejsce w wielu innych układach zaproponowanych do realizacji tego typu modów. Ponadto samo występowanie nadprzewodnictwa jest cechą występującą w rodzinie materiałów na bazie miedzi do których odnosi się przeprowadzona analiza.

Osiągnięcie habilitacyjne dra J. Herbrycha zawiera kompleksową analizę właściwości orbitalno-selektywnej fazy Motta w niskowymiarowych systemach wielopasmowych przy użyciu zaawansowanych narzędzi teoretycznych. Problemy dyskutowane w osiągnięciu są istotne oraz aktualne dla środowiska naukowego o czym świadczą publikacje w wiodących światowych czasopismach naukowych. Wyniki jakie udało się otrzymać w ramach badań stanowią ważny wkład do fizyki wielo-orbitalnych układów oddziałujących elektronów co daje jednoznacznie pozytywną ocenę osiągnięcia naukowego Habilitanta.

### **3) Ocena pozostałej aktywności naukowej**

Poza pracami H1-H6 dr Herbrych był współautorem 31 publikacji, które ukazały się w bardzo dobrych czasopismach naukowych. Tematyka tych prac dotyczy transportu w niskowymiarowych układach kwantowych, lokalizacji wielociałowej oraz badań nad modelami wielopasmowymi. Nadmienić należy że 7 z tych publikacji ukazało się w czasopismach o bardzo wysokim Impact Factor,  $IF \geq 9$  (publikacje w Phys. Rev. Lett., Nat. Commun., oraz PNAS). Publikacje habilitanta jak podaje w autoreferacie były cytowane 576 razy (490 bez autocytowań), a indeks Hirscha wynosi 13. Na dzień przygotowania niniejszej recenzji wskaźniki te wzrosły do 634 cytowań (532 bez autocytowań) oraz  $H=15$ . Wartości te należy ocenić jako wysokie biorąc pod uwagę etap kariery naukowej dr Herbrycha. Widać też wyraźny wzrost liczby cytowań na przestrzeni lat. W ostatnich dwóch latach liczba cytowań przekraczała wartość 100 cytowań na rok.

Aktywność Habilitanta na polu konferencyjnym jest dość wysoka, wygłosił 14 referatów, w tym 11 na konferencjach zagranicznych oraz przedstawił 5 plakatów. Ponadto wygłosił 11 referatów na zaproszenie w zagranicznych oraz krajowych instytucjach naukowych. Dr Jacek Herbrych odbył dwa staże podoktorskie (Wydział Fizyki, Uniwersytet Kreteński oraz Wydział

Fizyki i Astronomii, Uniwersytet Tennessee) oraz jeden staż naukowy (Foundation for Research and Technology- Hellas, Heraklion, Grecja), a także był zatrudniony jako pracownik naukowy w kilku ośrodkach zagranicznych oraz krajowych. To pozwoliło zdobyć bogate doświadczenie oraz nawiązać liczne współprace naukowe.

Od momentu zatrudnienia na Politechnice Wrocławskiej w 2019 roku dr Herbrych jest aktywnym dydaktykiem. Jego działalność dydaktyczna, obejmuje prowadzenie 5 przedmiotów (3 laboratoria, oraz 2 wykłady) specjalistycznych o tematyce związanej z fizyką statystyczną, a także modelowaniem układów skorelowanych i metodami numerycznymi. Ponadto Habilitant był opiekunem indywidualnego toku studiów dla 2 studentów, był promotorem 2 prac magisterskich, 2 prac dyplomowych oraz promotorem pomocniczym w przewodzie doktorskim. Dr Herbrych udziela się na polu pracy organizacyjnej w jednostce, w której obecnie pracuję. Był członkiem rady Wydziału Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej, członkiem komisji programowej kierunku "Inżynieria kwantowa", opiekunem koła naukowego "Nabla" oraz uczestniczył w komisjach obron prac magisterskich oraz dyplomowych.

Dr Herbrych wykazuje zaangażowanie w realizację projektów naukowych. Był kierownikiem dwóch grantów naukowych w ostatnich latach (OPUS 18 oraz "Polskie powroty" NAWA). Ponadto był wykonawcą w dwóch programach europejskich realizowanych w latach 2013-2016 na Uniwersytecie Kreteńskim oraz w latach 2010-2013 w Instytucie Joźefa Stefana.

#### **4) Wnioski i rekomendacje**

Stwierdzam, że przedstawione mi do oceny osiągnięcie naukowe oraz pozostały dorobek naukowy i działalność dr Jacka Herbrycha bez wątpienia spełniają ustawowe i zwyczajowe wymogi stawiane kandydatom do nadania stopnia doktora habilitowanego. Cykl prac stanowiący osiągnięcie habilitacyjne stanowi rozbudowaną analizę własności orbitalno selektywnej fazy Motta przy użyciu zaawansowanych narzędzi teoretycznych. Wyniki przedstawione w pracach H1-H6 wnoszą istotny wkład w badania nad układami oddziałujących elektronów, w których ma miejsce współzawodnictwo pomiędzy ładunkowymi, orbitalnymi oraz spinowymi stopniami swobody. Dr Herbrych regularnie publikuje w prestiżowych czasopismach naukowych, z powodzeniem zdobywa oraz realizuje granty, ma doświadczenie w kierowaniu badaniami naukowymi oraz prowadzeniu doktorantów. Jest zatem w pełni gotowy do prowadzenia samodzielnej działalności naukowej. **Wnioskuje o nadanie dr. Jackowi Herbrychowi stopnia doktora habilitowanego nauk fizycznych.**