

Warszawa, 25 sierpnia 2022 r.

prof. dr hab. Piotr Bogusławski  
Instytut Fizyki PAN, Warszawa

**Recenzja dorobku naukowego i rozprawy habilitacyjnej pt. „Własności orbitalno-selektywnej fazy Motta w niskowymiarowych systemach wielopasmowych”  
pana dr Jacka Herbrycha**

Dr Jacek Herbrych uzyskał stopień magistra fizyki na Uniwersytecie Łódzkim w 2010 roku. Stopień doktora uzyskał na Uniwersytecie w Lublanie, Słowenia, w 2013 roku, a tytuł rozprawy brzmiał „Finite-temperature dynamics of quantum spin chains”. Po doktoracie pan Herbrych zatrudniony był w czterech międzynarodowych instytucjach, mianowicie w Instytucie Jozefa Stefana w Lublanie, na Uniwersytecie Kreteńskim w Heraklionie, Grecja, a także na University of Tennessee in Knoxville, oraz w Oak Ridge National Laboratory w USA. Od 2019 roku habilitant pracuje jako adiunkt na Politechnice Wrocławskiej.

Osiągnięciem naukowym będącym podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego jest cykl powiązanych tematycznie sześciu artykułów naukowych. Opublikowane one zostały w latach 2018-2021 w Nature Commun. i Phys. Rev. B (po 2 prace), i po jednej pracy w Phys. Rev. Lett., Proc. Natl. Acad. Sci. USA, czyli w doskonałych czasopismach. Publikacje te są wieloautorskie. We wszystkich przypadkach oświadczenia współautorów nie pozostawiają wątpliwości co do wiodącej roli habilitanta w trakcie planowania badań, rozwiązywania problemów i przygotowania prac do druku.

Autoreferat zawiera niezbędne informacje o działalności naukowej habilitanta i szczegółowe omówienie cyklu prac. Omówienie jest napisane jasno, dobrze zilustrowane odpowiednimi rysunkami, i przedstawia obecny stan wiedzy na temat badanych związków. Zawiera ono także przedstawienie podstawowych koncepcji teoretycznych użytych w obliczeniach.

**Ocena osiągnięcia naukowego**

Przedmiotem badań przeprowadzonych w rozprawie habilitacyjnej są związki żelaza z tzw. grupy 123, o składzie chemicznym  $AFe_2X_3$ , gdzie  $A=Cs$  i  $Ba$ , a  $X=S$  i  $Se$ . Wysokotemperaturowymi nadprzewodnikami są także pokrewne związki Fe takie jak FeSe, które jednak nie są badane przez dr Herbrycha. Zainteresowanie tą grupą materiałów wynika w znacznej mierze z ich własności nadprzewodzących, oraz z pewnych podobieństw do bardzo intensywnie badanych nadprzewodzących miedzianów.

Przejście do stanu nadprzewodzącego w rodzinie 123 obserwowane jest w temperaturach rzędu 10 K, i jedynie pod ciśnieniem hydrostatycznym. Doświadczalne diagramy fazowe tych związków pokazują, iż nadprzewodnictwo pojawia się w pobliżu antyferromagnetyzmu (AFM). Współistnienie tych faz sugeruje głębszy związek między oboma efektami, a w szczególności możliwość parowania elektronów poprzez oddziaływania magnetyczne. W tej sytuacji analiza oddziaływań magnetycznych może okazać się pomocna w zrozumieniu mechanizmu parowania w badanej rodzinie materiałów.

Należy tu jednak podkreślić, iż zarówno publikacje wchodzące w skład rozprawy, jak i pozostałe prace pana Herbrycha z tej tematyki, nie zajmują się mechanizmem nadprzewodnictwa, co sygnalizuje zresztą już tytuł rozprawy.

Jak wiadomo, struktura elektronowa kryształu określona jest zarówno przez strukturę krystaliczną jak i przez skład chemiczny. Struktura krystaliczna rodziny 123 jest złożona, m.in. ze względu na stechiometrię i skład chemiczny, z których wynika że komórka elementarna liczy 6 (lub krotność 6) atomów. Podsieć Fe ma przestrzenną strukturę drabin, czyli tworzy układ quasi 1-wymiarowy. Jony Fe znajdują się w otoczeniu tetraedrycznym (a nie oktaedrycznym, jak czytamy w autoreferacie), jednak geometria najbliższych sąsiadów S lub Se jest zdeformowana. W konsekwencji orbitalny kwintet  $d(\text{Fe})$  nie jest rozszczepiony na dublet i tryplet, lecz na 5 poziomów. Dalej, 3 najbliższych sąsiadów Fe danego jonu Fe należy do tej samej drabiny, lecz odległości Fe-Fe pomiędzy nimi są różne. W wyniku niskiej lokalnej symetrii pasmo generowane przez orbitale  $3d(\text{Fe})\uparrow$  ma szerokość 6 eV, czyli jest stosunkowo silnie rozmyte, a związki 123 są antyferromagnetycznymi półprzewodnikami z przerwami energetycznymi rzędu 0.1 eV (Monney et al., Phys. Rev. B 88).

Wyznaczone doświadczalnie diagramy fazowe są bogate, czyli wykazują istnienie szeregu modów uporządkowania magnetycznego (w tym tzw. magnetyzm blokowy), a także zależą od związku. Co więcej, na poziomie mikroskopowym doświadczenie wykazuje współistnienie sprzężenia FM i AFM pomiędzy jonami Fe, oraz różne orientacje spinów jonów Fe względem płaszczyzn żelazowych.

Celem rozprawy było przeprowadzenie szeroko zakrojonych badań struktury pasmowej oraz własności magnetycznych i transportowych związków 123. Ponieważ ich skomplikowana struktura pasmowa bardzo wydłuża obliczenia i utrudnia interpretację wyników, autorzy publikacji H1-H6 zdecydowali się na korzystanie z uproszczonego modelu. Model koncentruje się na podsieci żelazowej, ponieważ to jony Fe są spolaryzowane spinowo i odpowiadają za magnetyzm, a także – co równie istotne – pasma w pobliżu energii Fermiego zbudowane są głównie z orbitali  $d(\text{Fe})$ . Uproszczenia obejmują strukturę elektronową, gdyż model uwzględnia jedynie 3 pasma wygenerowane przez 3 orbitale  $d(\text{Fe})$ . (W niektórych pracach model jest ograniczony do 2 orbitali, np. w pracy H2, lub wręcz do jednego orbitalu.) Uproszczenia dotyczą też struktury krystalicznej. Mianowicie część obliczeń wykonana jest dla quasi-jednowymiarowych drabin Fe, czyli dla konfiguracji jonów Fe obserwowanej w związkach 123, często jednak obliczenia wykonane są dla uproszczonej geometrii jednowymiarowych łańcuchów Fe. Stosowany w rozprawie model scharakteryzowany jest paroma parametrami, mianowicie stałymi Hubbarda  $U$  i Hunda  $J_H$ , wielkością rozszczepienia stanów  $d(\text{Fe})$  przez pole krystaliczne, oraz stałymi przeskoku (lub szerokościami pasm). Model dopuszcza też możliwość przeskoku par elektronów. Zwróćmy uwagę, iż habilitant zakłada że 3 orbitale  $d(\text{Fe})$  uwzględnione w modelu są orbitalami  $t_2$ . Otóż jon żelaza w kryształach na ogół znajduje się w stanie ładunkowym  $\text{Fe}^{2+}$ , czyli w konfiguracji  $d^6$ , w której obsadzone są nie tylko orbitale  $t_2\uparrow$ , lecz też  $e_g\downarrow$ . Podejrzewam, że założona w modelu istotnie różna dyspersja pierwszych dwóch pasm od dyspersji trzeciego pasma oddaje do pewnego stopnia ów fakt. Tak sformułowany model jest wieloorbitalnym modelem Hubbarda, uwzględniającym proste i wymienne wewnątrzcentrowe oddziaływanie kulombowskie. W odpowiednim zakresie parametrów prowadzi on do tytułowej orbitalno-selektywnej fazy Motta (Orbital Selective Mott Phase, OSMP). Rozwiązania modelu otrzymano przy pomocy metody grupy renormalizacji macierzy gęstości z podejściem jednego węzła centralnego.

Ważnym elementem modelu jest możliwość zmiany obsadzenia poszczególnych pasm, co pozwala na głębszą analizę fizyki, oraz na możliwości interpretacji doświadczeń prowadzonych na kryształach o kontrolowanej koncentracji nośników.

O przybliżeniach zastosowanych w modelu należy pamiętać podczas dyskusji otrzymanych wyników, zwłaszcza subtelnych efektów, ponieważ część z nich może okazać się artefaktami modelu. Jest to ważne zwłaszcza w sytuacji, gdy dane doświadczalne są skąpe. Drugim problemem komplikującym porównanie teorii z doświadczeniem jest złożona struktura krystaliczna związków 123, na skutek której w realnych próbkach istnieje szereg defektów rodzimych, takich jak luki czy odstępstwa od stechiometrii. To właśnie one często decydują o metalicznym bądź izolującym charakterze próbki, a co za tym idzie, o typie i sile oddziaływań magnetycznych.

Przechodzę teraz do krótkiego omówienia poszczególnych publikacji. W pracy **H2** zbadany został magnetyczny diagram fazowy quasi-jednowymiarowych drabin spinów w modelu OSMP. Wyniki pokazały zależność porządku magnetycznego od domieszkowania, i dla odpowiednich wartości parametrów modelu odtworzyły doświadczalne własności magnetyczne związków  $\text{Rb}_{0.89}\text{Fe}_{1.58}\text{Se}_2$  i  $\text{K}_{0.8}\text{Fe}_{1.6}\text{Se}_2$ , które zapewne są zbliżone do własności magnetycznych rodziny 123. W szczególności analiza objęła tzw. magnetyzm blokowy, w którym spiny tworzą ferromagnetycznie uporządkowane wyspy sprzężone antyferromagnetycznie.

Badania przeprowadzone w pracy **H2** rozszerzone zostały w publikacji **H3**. Wykazano w niej istnienie kolejnych egzotycznych faz magnetyzmu, mianowicie fazy spirali bloków ferromagnetycznych, którą można uważać za "uogólniony magnetyzm blokowy". O stabilności kolejnych faz decyduje zarówno stosunek  $U/W$ , jak i (przede wszystkim) wypełnienie orbitali magnetycznych. Ten ostatni wynik sugeruje, iż przejścia międzyfazowe można badać doświadczalnie poprzez zmianę koncentracji nośników (co może być łatwiejsze od zmiany stosunku  $U/W$ ).

Praca **H6** jest dalszym krokiem w stronę uzyskania wyników nawiązujących do doświadczenia. Otóż w pracach **H2** i **H3** zbadana została struktura jednowymiarowe, podczas gdy jony Fe w materiałach 123 tworzą quasi-jednowymiarowe drabiny. Własności magnetyczne tego układu podsumowane zostały na odpowiednim diagramie fazowym stosującym jako zmienne ( $U/W$ ) i wypełnienia pasm. Z diagramu wynika, że w zależności od parametrów układu stabilizuje się 7 faz o bardzo różnych typach porządku magnetycznego. Wyniki silnie zależą od wypełnienia pasm, co wskazuje iż doświadczalnie porządek może zależeć od domieszkowania, stechiometrii kryształu, czy też obecności defektów rodzimych stanowiących nieintencjonalne domieszki.

Dynamiczne własności spinów zbadane zostały w pracy **H1**. Obliczenia dynamicznego współczynnika struktury magnetycznej przeprowadzono w ramach trójpasowego i jednowymiarowego modelu Hubbarda. Obliczenia wykazały istnienie dwóch typów wzbudzeń rozdzielonych przerwą energetyczną. Pierwszym jest niskoenergetyczne i dyspersyjne pasmo akustyczne, a drugim bezdyspersyjne pasmo optyczne, o wzbudzeniach zlokalizowanych na jednym węźle. Co ważne, wyniki te wykazują jakościowe podobieństwo do wyników doświadczalnych dla związków 123. Dalsza analiza wzbudzeń spinowych przeprowadzona jest w pracy **H4** dla stanu magnetyzmu blokowego, w ramach modelu OSMP. W pracy tej przeprowadzono szczegółową analizę wpływu stałych  $U$  i  $J_{\parallel}$ .

Z obliczeń wykonanych w pracy **H5** wynika, że przy odpowiednich wartościach parametrów w jednowymiarowym układzie spinów będącym w fazie OSMP może pojawić się krawędziowy stan

Majorany w przerwie wzbronionej widma energetycznego. Ta bardzo interesująca praca ma po części charakter spekulatywno-modelowy biorąc pod uwagę obecne możliwości doświadczalne. Ciekawym wynikiem jest, że przejście do fazy nietrywialnej topologicznie indukowane jest oddziaływaniem wymiennym, związanym z polaryzacją spinową jonów metali przejściowych. Na ogół bowiem istnienie fazy topologicznej związane jest z silnym oddziaływaniem spin-orbitalnym (a nie orbitalowym, jak pisze habilitant) i efektami relatywistycznymi charakteryzującym ciężkie pierwiastki, które tworzą układy takie jak CdTe/HgTe, czy PbTe/SnTe. W pracy H5 efekty te są pominięte, a model wykazuje jednoczesne pojawienie się magnetycznego uporządkowania spinów, nadprzewodnictwa, i fermionów Majorany na krawędziach układu.

Podsumowując stwierdzam, że prace H1-H6 stanowią zwarty tematycznie blok publikacji przedstawiających całościowy obraz własności elektronowych i magnetycznych układów w fazie OSMP zawierających "jony Fe". Własności magnetyczne stopów z rodziny 123 są bogate, intensywnie badane, a ich zrozumienie może przyczynić się też do wyjaśnienia mechanizmu nadprzewodnictwa. Wybór tematyki badań jest więc trafny i na czasie. Obliczone diagramy fazowe uporządkowania magnetycznego są niespodziewanie bogate. Jako teoretyk posługujący się metodami z pierwszych zasad opartymi na teorii funkcjonału gęstości doceniam siłę publikacji, które przez swoje uproszczenia wydobywają podstawowe trendy i efekty fizyczne określające własności badanych układów, oraz umożliwiają czytelną interpretację wyników.

Z uznaniem podkreślam fakt, że warsztat teoretyczny dr Herbrycha bogaty i zaawansowany metodologicznie, a także jego sprawność rozwiązywaniu złożonych problemów numerycznych. W szeregu wypadkach poddaje on 3-orbitalny model OSMP dalszym uproszczeniom, lecz za każdym razem wnikliwie testuje adekwatność i dokładność przybliżeń, co zwiększa zaufanie do przedstawionych wyników.

## Pozostałe osiągnięcia naukowe

### Dorobek publikacyjny

Dorobek publikacyjny dr Herbrycha oceniam bardzo wysoko, zwłaszcza biorąc pod uwagę to, że powstał on w ciągu 9 lat po doktoracie. Poza publikacjami wchodzącymi w skład rozprawy, obejmuje on 31 publikacji w bardzo dobrych czasopismach międzynarodowych, w tym 23 w Phys. Rev. B, po jednej w Phys. Rev. A i E, oraz 3 w Phys. Rev. Lett. Podobnie jak prace H1-H6, są to prace wieloautorskie. Ich tematyką jest transport w niskowymiarowych układach kwantowych, lokalizacja wielociałowa i badania modeli wielopasmowych. Pan Herbrych jest też współautorem 5 publikacji przed uzyskaniem stopnia doktora.

Według bazy Web of Science z lutego 2022 r. liczba opublikowanych artykułów przez pana Herbrycha wynosi 37, i prace te są cytowane 576 razy (490 bez autocytowań), czyli średnia liczba cytowań to 15.57. Indeks Hirscha jest odpowiednio wysoki i wynosi 13, co wymownie ilustruje międzynarodowy oddźwięk z którym spotkały się te publikacje.

## **Uczestnictwo w projektach badawczych**

Kolejnym przykładem aktywności zawodowej habilitanta jest **kierowanie dwoma projektami badawczymi**. Są to projekty NCN OPUS 18 2019/35/B/ST3/01207, realizowany w latach 2020-2022 o budżecie 198 600 zł, oraz projekt Polskie Powroty (PPN/PPO/2018/1/00035). Budżet tego projektu realizowanego w latach 2019-2022 wynosi 1 125 000 zł.

Pan Herbrych był także **wykonawcą w dwóch projektach europejskich**, mianowicie w projekcie EU FP7 PEOPLE-ITN-2008 238475, realizowanym w latach 2013-2016 na Uniwersytecie Kreteńskim (Heraklion, Greece), oraz EU FP7 PEOPLE-ITN-2008 238475, realizowanym w latach 2010-2013 w Instytucie Jožefa Stefana w Ljubljanie, Słowenia.

**Wystąpienia naukowe** pana Herbrycha obejmują 14 referatów i 5 plakatów przedstawionych na konferencjach krajowych bądź zagranicznych. W dorobku habilitanta brak referatów zaproszonych, co rekompensowane jest 11 referatami wygłoszonymi w poważnych instytucjach naukowych, w tym na uniwersytetach w Warszawie, Lublinie, Getyndze i Stuttgarcie, a także w IF PAN.

Dr Herbrych nawiązał **współpracę naukową** z ośrodkami w Grecji, Słowenii, US, Niemczech, Kanadzie, a także z Uniwersytetem Warszawskim. Nawiązane kontakty znalazły swe odbicie blisko 40 wspomnianych powyżej publikacjach. Jest on także recenzentem w czołowych czasopiśmie takich jak Phys. Rev. Lett. i Phys. Rev., oraz członkiem American Physical Society.

## **Dorobek dydaktyczny**

Działalność dydaktyczna obejmuje 2 wykłady i 3 laboratoria numeryczne prowadzone na Politechnice Wrocławskiej w latach 2019-2021. Pan Herbrych jest także promotorem 2 prac inżynierskich, dwóch prac magisterskich, promotorem pomocniczym rozprawy doktorskiej, opiekunem indywidualnego toku studiów 2 studentów, oraz kierownikiem grupy badawczej w ramach wymienionego wyżej projektu Polskie Powroty.

Działalność dydaktyczna jest więcej niż zadowalająca zważywszy na fakt, że pan Herbrych pracuje na Politechnice Wrocławskiej zaledwie od 2019 roku. Być może jest to przyczyną tego, że nie prowadził on działalności popularyzatorskiej.

W końcu dr Herbrych jest **członkiem Rady Naukowej Wydziału Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej**, gdzie prowadzi także odpowiednią działalność administracyjną.

## Podsumowanie

Podsumowując stwierdzam, że dorobek naukowy dr Jacka Herbrycha, przedstawiony w zarówno w monotematycznym cyklu 6 publikacji, stanowiącym jego rozprawę habilitacyjną, jak i w pozostałych artykułach naukowych spoza cyklu, jest ponadprzeciętny. Przyznanie stopnia doktora habilitowanego jest potwierdzeniem samodzielności i dojrzałości naukowej. Zważywszy na wymienione powyżej osiągnięcia publikacyjne, nawiązane współpracy naukowe, inicjatywę w zdobywaniu funduszy na badania, a także działalność edukacyjną można stwierdzić, że to istotne kryterium jest z pewnością spełnione przez pana Herbrycha.

W związku z tym uważam, że osiągnięcie naukowe pt. "Własności orbitalno-selektywnej fazy Motta w niskowymiarowych systemach wielopasmowych", a także pozostały dorobek i aktywność naukowa dr. Jacka Herbrycha spełnia z nawiązką odnośne wymagania Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z 20 lipca 2018 r., i wnioskuję o nadanie panu Jackowi Herbrychowi stopnia doktora habilitowanego nauk fizycznych.



prof. dr hab. Piotr Bogusławski