

Prof. dr hab. Romuald Lemański  
Instytut Niskich Temperatur  
i Badań Strukturalnych PAN  
we Wrocławiu

Wrocław, 3.08.2018 r.

### Recenzja

#### osiągnięcia naukowego w postaci cyklu publikacji pt. „Propagacja orbitonu w antyferromagnetyku” oraz aktywności naukowej dra Krzysztofa Wohlfelda

#### Informacje ogólne o karierze naukowej dra Krzysztof Wohlfelda

Dr Krzysztof Wohlfeld zwany dalej Habilitantem rozpoczął swoją karierę naukową na UJ w Krakowie pod kierunkiem prof. dr hab. Andrzeja M. Olesia, który był promotorem jego pracy magisterskiej, zatytułowanej "*Double exchange model for degenerate  $t_{2g}$  orbitals*" i doktorskiej, pt. "*Beyond the standard t-J model*" oraz opublikował wspólnie z Habilitantem ponad 10 prac naukowych.

Po obronie pracy doktorskiej dr Krzysztof Wohlfeld został zatrudniony od października 2009 do października 2012 jako *postdoc* w Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden (Niemcy), gdzie pracował w grupie prof. Jeroena van den Brinka (od maja 2010 do maja 2012 w ramach stypendium Alexander von Humboldt-Stiftung). Kolejną posadę jako *postdoc* otrzymał w Stanford Institute for Materials and Energy Sciences (USA), gdzie od listopada 2012 do lutego 2015 pracował w grupie prof. Thomasa P. Devereaux. A od lutego 2015 do chwili obecnej jest zatrudniony na stanowisku adiunkta na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego w Katedrze Fizyki Materii Skondensowanej Instytutu Fizyki Teoretycznej.

Swoją dojrzałość naukową dr Krzysztof Wohlfeld zdobywał też w czasie licznych staży zagranicznych, będąc pod opieką wybitnych naukowców w znanych ośrodkach naukowych, takich jak:

1. Paul Scherrer Institut (Szwajcaria), 07/2003-09/2003, praktyka studencka.
2. Universiteit Leiden (Holandia), 01/2004-06/2004, studia pod opieką prof. Jana Zaanena.
3. Max-Planck-Institut für Festkörperforschung (MPI-FKF, Niemcy), 2007-2008 (łącznie 10 miesięcy), staż doktorski.
4. University of British Columbia (Kanada), 01/2008, staż doktorski.
5. Argonne National Lab, X-ray Science Division (USA), 12/2102, staż w grupie dra M. van Veenendaala.

#### 1. Ocena osiągnięcia naukowego w postaci w/w cyklu publikacji

Przedstawionym do recenzji osiągnięciem naukowym Habilitanta jest cykl 8 publikacji poświęconych analizie kolektywnych wzbudzeń orbitalnych zwanych *orbitonami* w tlenkach metali przejściowych, w których występuje uporządkowanie orbitalne typu FO oraz spinowe

typu AF. Głównym celem tych badań było wykazanie istnienia *orbitonów* w tych układach oraz zrozumienie i opisanie ich propagacji, a następnie zinterpretowanie na tej podstawie wyników otrzymanych w eksperymentach rezonansowego nieelastycznego rozpraszania promieniowania rentgenowskiego (RIXS). Zadanie to było bardzo ambitne, ponieważ aż do 2012 r. nie było przekonujących dowodów eksperymentalnych, które jednoznacznie potwierdzałyby występowanie takich wzbudzeń w jakimkolwiek związku metalu przejściowego, pomimo tego, że teoria je przewidywała.

Próbując zrozumieć przyczyny tego braku zgodności teorii i eksperymentu dr Krzysztof Wohlfeld podjął współpracę zarówno z teoretykami jak i eksperymentatorami zajmującymi się tym problemem. Wkrótce po rozpoczęciu tej współpracy zorientowano się, że istnieją spore szanse na zaobserwowanie propagacji *orbitonów* w tlenkach metali przejściowych, które w stanie podstawowym mają uporządkowanie orbitalne typu FO oraz spinowe typu AF, a nie jak dotychczas sądzono w układach z degeneracją orbitalną. Dlatego w cyklu prac stanowiących osiągnięcie naukowe Habilitanta zawężono poszukiwania *orbitonów* do takich właśnie układów.

W pracach tych wykorzystano *model spinowo-orbitalny*, który rozwijano począwszy od tzw. "minimalnej" wersji, poprzez wersje bardziej złożone, uwzględniające m.in. sprzężenie spinowo-orbitalne aż po związane z oddziaływaniem z fononami efekty Jahna -Teller'a. We wszystkich tych przypadkach dokonywano odwzorowania (mapowania) *modelu spinowo-orbitalnego* na model propagacji pojedynczej dziury w *modelu t-J*. W przypadku 1D zabieg ten jest ścisły i prowadzi on do separacji spinowo-orbitalnej. Natomiast w innych przypadkach niż 1D jest to już przybliżenie, aczkolwiek dość dobrze odpowiadające sytuacji zaobserwowanej np. w związku  $\text{CaCu}_2\text{O}_3$ , który ma postać tzw. "zwichrowanej drabiny".

Po dopasowaniu w oparciu o przesłanki fizyczne odpowiedniej wersji *modelu spinowo-orbitalnego* do konkretnego materiału obliczono funkcje spektralne, opisującą propagację wzbudzeń orbitalnych i spinowych (ewentualnie pseudospinowych) dodanych do AF stanu podstawowego. Dzięki temu, że obliczenia te wykonano przez odwzorowanie (mapowanie) propagacji *orbitonu* w *modelu spinowo-orbitalnym* na propagację pojedynczej dziury w antyferromagnetyku opisanym *modelem t-J*, można było m.in. znacznie zredukować liczbę stopni swobody i uzyskać numeryczne rozwiązania dla większych klastrów niż można to osiągnąć metodą bezpośredniej diagonalizacji Hamiltonianu.

W przypadku *quasi*-jednowymiarowego izolatora Motta  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$  opisano tą metodą wzbudzenia spinowe i orbitalne, wykazując przy tym separację tych wzbudzeń. Uważam, że jest to jeden z najcenniejszych rezultatów w recenzowanym cyklu prac (został opublikowany w prestiżowym czasopiśmie *Nature*) nie tylko dlatego, że uzyskano tu dobrą zgodność pomiędzy obliczoną i zmierzoną eksperymentalnie dyspersją tych wzbudzeń, ale przede wszystkim dlatego, że dzięki odpowiednio przeprowadzonej analizie teoretycznej udało się na podstawie danych eksperymentalnych potwierdzić istnienie wzbudzeń orbitalnych w tym związku.

Również w związku o strukturze drabiny  $\text{CaCu}_2\text{O}_3$ , a także w *quasi*-2D tlenkach irydowych  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  i  $\text{Ba}_2\text{IrO}_4$  udało się odtworzyć spektra wzbudzeń orbitalnych jakościowo oraz w dużej mierze też ilościowo.

Tak więc łącząc wysiłki eksperymentatorów posługujących się najnowocześniejszymi obecnie urządzeniami i technikami pomiarowymi oraz teoretyków modelujących propagację wzbudzeń potwierdzono występowanie *orbitonów* wybranych tlenkach metali przejściowych. Dlatego

moim zdaniem główny cel badań przedstawionych w cyklu prac stanowiących osiągnięcie Habilitanta został osiągnięty. Wartość merytoryczna tych badań jest na najwyższym światowym poziomie i potwierdza to już sam fakt, że ukazały się w jednych z najlepszych czasopism naukowych.

Ponieważ jednak są to prace wieloautorskie, to pozostaje jedynie ustosunkowanie się do kwestii udziału Habilitanta w ich powstaniu. Otóż z tego faktu, że dr Krzysztof Wohlfeld jest pierwszym autorem aż 4 spośród 8 prac stanowiących podstawę jego habilitacji, jak również na podstawie oświadczeń współautorów, którzy precyzyjnie określili jaki był ich wkład, wnoszę, że odegrał on kluczową rolę w ich powstaniu. Utwierdza mnie w tym również dokumentacja dostarczona razem ze zbiorem tych 8 publikacji, która zawiera m.in. informacje o zakresie pracy wykonanej przez Habilitanta w każdej z nich, a także dość obszerny opis całości badanego zagadnienia wskazujący na głębokie zrozumienie przedmiotu badań przez Habilitanta.

Należy jeszcze dodać, że zastosowane w tych pracach metody teoretyczne są dość zaawansowane matematycznie i wymagają m.in. dobrej znajomości *modeli spinowo-orbitalnych*, *modelu t-J*, a także formalizmu związanego z obliczaniem funkcji spektralnych.

Wszystko to wskazuje na znaczny wkład Habilitanta w rozwój badań na wzbudzeniach orbitalnymi w układach silnie skorelowanych fermionów.

## **2. Ocena aktywności naukowej**

### **a) dorobek publikacyjny**

Do momentu złożenia wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego Dr Krzysztof Wohlfeld opublikował w sumie 34 prace w czasopismach o zasięgu międzynarodowym, przy czym 23 z nich powstało po uzyskaniu przez niego stopnia doktora. Prace te ukazały się w renomowanych czasopismach takich jak: *Phys. Rev. B* (11 prac), *Phys. Rev. Lett.* (6 prac), *AIP Conf. Proc.* (4 prace), po dwie prace w *Nature Communications*, *Phys. Rev. X*, *Acta Phys. Pol. A*, *Physica Status Solidi (b)* oraz po jednej w *Nature*, *Scientific Reports*, *Europhys. Lett.*, *J. Phys.: Conf. Ser.* i *Physica C*. Warto tu jeszcze dodać, że w ostatnim czasie ukazały się jeszcze 2 prace (obie w *Phys. Rev. B*), których Habilitant jest współautorem.

Pod względem ilościowym, a przede wszystkim ze względu na wysoką rangę wymienionych tu czasopism, jest to wynik wręcz imponujący. Można przypuszczać, że dla uzyskania tak dobrego rezultatu nie bez znaczenia była współpraca Habilitanta z wybitnymi naukowcami pracującymi w jednych z najlepszych centrów naukowych w Europie i USA. Rzeczywiście, zdecydowana większość tych prac jest wieloautorska, a tylko 4 z nich (wszystkie opublikowane jeszcze przed doktoratem w *AIP Conf. Proc.*) są monoautorskie. Co więcej, niektóre z tych prac mają nawet kilkunastu współautorów, co wynika z faktu, że powstały one w wyniku współpracy zespołów teoretyków i eksperymentatorów. Można stąd wnioskować, że Habilitant został przyjęty do zespołów badawczych w renomowanych ośrodkach naukowych i potrafił owocnie to wykorzystać współpracując zarówno z teoretykami jak i eksperymentatorami.

Biorąc pod uwagę przedstawione tutaj dane jestem całkowicie przekonany, że dorobek publikacyjny dra Krzysztof Wohlfelda, zarówno ilościowy jak i jakościowy, spełnia nawet z nadwyżką wymagania niezbędne do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego. Istotnie, całkowity *impact factor* wszystkich opublikowanych prac wynosi 184,895, a *impact*

factor cyklu prac składających się na habilitację wynosi 76,732, z czego aż 44,958 przypada na artykuł w niezwykle wysoko notowanym czasopiśmie *Nature*. To są bardzo dobre wyniki, świadczące m.in. o tym, że prace Habilitanta ukazały się w czasopismach ciesząc się dużym uznaniem. Warto przy tym podkreślić, że dr Krzysztof Wohlfeld jest wymieniany jako pierwszy autor w 17 spośród 32 publikacji wieloautorskich, co wskazuje na jego pierwszoplanową rolę w ich powstawaniu.

Bardzo duża jest też ilość cytowań prac Habilitanta. Według naukowej bazy danych *Web of Sciences* całkowita liczba cytowań wynosi 538, a bez auto cytowań 462. W znacznym stopniu przyczyniła się do tego praca przeglądowa w *Nature*, która była cytowana już 134 razy. Wysoka jest też średnia ilość cytowań przypadająca na jedną pracę wynosząca prawie 15, podczas gdy indeks Hirscha jest równy 13. Na etapie kariery naukowej poprzedzającym habilitację te wyniki są imponujące i świadczą o tym, że dorobek naukowy Habilitanta jest już na bardzo wysokim światowym poziomie.

Przytoczone tutaj dane dotyczące cytowań świadczą wyraźnie o tym, że wymienione prace, których współautorem jest dr Krzysztof Wohlfeld zostały zauważone i docenione w środowisku międzynarodowym i że wniosły one istotny wkład w rozwój dziedziny, którą się zajmują.

#### **b) inne osiągnięcia naukowo-badawcze**

Na uznanie zasługuje fakt, że Habilitant został kierownikiem finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki projektu badawczego p.t. „*Kolektywne wzbudzenia w tlenkach metali przejściowych: nierozwiązane problemy i nowe właściwości*”, który został jemu przyznany aż na -5 lat (2017 – 2022) w ramach konkursu „Sonata Bis”. Oprócz tego był on wykonawcą w czterech zakończonych już projektach krajowych i jest wykonawcą w jednym aktualnie trwającym projekcie.

Dr Krzysztof Wohlfeld został wręcz obsypany różnymi nagrodami i wyróżnieniami. Już w czasie studiów na Uniwersytecie Jagiellońskim otrzymywał stypendium Ministra Edukacji Narodowej i Sportu w latach 2002-2005 za wyniki w nauce i aktywność naukową oraz stypendium Europejskiego Towarzystwa Fizycznego, częściowo finansujące jego półroczne studia na Uniwersytecie w Lejdzie (Leiden) w Holandii w 2004 r. Wiele stypendiów otrzymał też w czasie studiów doktoranckich, w tym trzy krajowe (stypendium konferencyjne od Fundacji na rzecz Nauki Polskiej i Towarzystwa Naukowego Warszawskiego w 2006 r., stypendium im. Florentyny Kogutowskiej (UJ) finansujące wyjazd za granicę w 2007 r., stypendium naukowe dla najlepszych doktorantów na UJ w latach 2006-2007) oraz jedno zagraniczne (Max-Planck-Gesellschaft) finansujące dwa pięciomiesięczne staże naukowe w Max-Planck-Institut für Festkörperforschung (MPI-FKF) w Sztutgarcie w latach 2008-2009.

Także po uzyskaniu doktoratu dr Krzysztof Wohlfeld otrzymał wiele nagród, wyróżnień i stypendiów. Do najważniejszych z nich zaliczyłbym:

1. Otrzymanie grantu „*Ambizione*” od Swiss National Science Foundation w 2014 (381 000 CHF na 3 lata), z którego jednak Habilitant nie skorzystał ze względu na podjęcie pracy na UW.
2. Nagroda im. H. Niewodniczańskiego z Instytutu Fizyki UJ w 2015, przyznawana co 3 lata dla najlepszego absolwenta Instytutu Fizyki UJ poniżej 35 roku życia.
3. Nagroda indywidualna III stopnia Rektora UW w 2016 r. za działalność naukową.

4. Stypendium im. Aleksandra von Humboldta na dwuletni pobyt w Niemczech dla naukowców po doktoracie (postdoc) w latach 2010-2012 za dotychczasową działalność naukową.

5. Stypendium Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego na okres 2015-2018 dla wybitnych młodych naukowców także za dotychczasową działalność naukową.

Swoje wyniki Habilitant prezentował na ponad pięćdziesięciu krajowych i międzynarodowych konferencjach, warsztatach, szkołach i sympozjach, przy czym na około dwudziestu z nich występował w roli zaproszonego wykładowcy. Mniej więcej tyle też razy wygłosił referat ustny a kilkanaście razy przedstawiał swoje wyniki na plakatach. Wśród tych konferencji i innych spotkań naukowych były zarówno takie, których tematyka była dość ściśle związana z fizyką wzbudzeń spinowo-orbitalnych, ale również wielkie zebrania naukowców o bardzo szerokiej tematyce, jak np. odbywające się corocznie w USA tzw. *APS March Meetings*, w których Habilitant uczestniczył aż czterokrotnie w latach 2010-2014, za każdym razem prezentując jeden lub nawet dwa referaty ustne.

Tak liczne wystąpienia na konferencjach, zwłaszcza wtedy, kiedy dr Krzysztof Wohlfeld był zaproszony do wygłoszenia referatu, świadczą nie tylko o jego dobrej znajomości prezentowanych badań i zainteresowaniu środowiska naukowego tymi badaniami, ale także o uznaniu międzynarodowej pozycji Habilitanta i o jego zdolnościach przekazywania swojej wiedzy w sposób atrakcyjny.

Oprócz wystąpień konferencyjnych dr Krzysztof Wohlfeld wygłosił też wielokrotnie referaty na seminariach w renomowanych ośrodkach w Polsce (UW i IF PAN w Warszawie, UJ w Krakowie, UŚ w Katowicach, UMCS w Lublinie, INTiBS PAN we Wrocławiu) oraz za granicą (Niemcy: CFEL w Hamburgu, Uniwersytet w Kolonii, MPI FKF w Sztutgarcie; Szwajcaria: ETH w Zurychu, PSI w Villigen, Uniwersytet we Fryburgu, Uniwersytet w Genewie; Francja: ESRF w Grenoble; Włochy: Uniwersytet w Salerno; Kanada: UBC w Vancouver; USA: Argonie National Lab w Chicago, UT w Knoxville, SLAC i Stanford University w Manlo Park).

Na uwagę zasługuje też fakt, że dr Krzysztof Wohlfeld recenzował bardzo wiele manuskryptów w renomowanych czasopismach naukowych, w tym m.in. aż 25 w *Phys. Rev. B*, 10 w *Phys. Rev. Lett.* i 3 w *Nature Communications*. Był też recenzentem dwóch zagranicznych prac doktorskich (na Politechnice w Mediolanie w 2016 r. oraz na Politechnice w Dreźnie w 2018 r.).

### **c) działalność dydaktyczna i popularyzatorska**

Na uznanie zasługuje też aktywna działalność dydaktyczna dra Krzysztofa Wohlfelda, szczególnie od momentu jego zatrudnienia na UW, obejmująca m.in. prowadzenie wykładów i ćwiczeń z mechaniki kwantowej dla studentów II-go roku oraz kursu p.t. „*Quantum theory of magnetism and its application to real materials*” dla studentów II i III stopnia. Również w ramach działalności dydaktycznej Habilitant był promotorem dwóch licencjatów i dwóch magistrantów, oraz sprawował zarówno formalną jak i nieformalną opiekę nad kilkoma innymi studentami w trakcie ich specjalizacji. Sprawował też opiekę jako promotor pomocniczy nad dwoma doktorantami, oraz nieformalną opiekę nad kilkoma innymi doktorantami obcokrajowcami z ośrodków zagranicznych.

Dr Krzysztof Wohlfeld prowadził także bardzo szeroką działalność popularyzatorską, angażując się m.in. wielokrotnie w organizację Festiwalu Nauki UJ w Krakowie w latach 2003-2009.

Również w Krakowie wygłosił on kilkakrotnie popularnonaukowe wykłady dla licealistów w latach 2006 i 2008. W sposób popularny przedstawił też swoją tematykę naukowcom z innych dziedzin przy okazji różnych ogólnych spotkań naukowych (m.in. podczas Humboldt Foundation Network Meeting we Freibergu (Niemcy) w 2010, podczas spotkania Polish Scientific Networks w Warszawie w 2015, na symposium Instytutu Fizyki Teoretycznej Wydziału Fizyki UW w Warszawie w 2015, podczas warsztatów FoKA (Fotony-Kwanty-Atomy) w Kazimierzu Dolnym w 2017).


**d) działalność organizacyjna**

Bardzo aktywna była też i nadal jest działalność organizacyjna Habilitanta. Jako przedstawiciel niesamodzielných pracowników naukowych jest on od 2016 r. członkiem Rady Wydziału Fizyki UW oraz członkiem i sekretarzem Rady Naukowej Instytutu Fizyki Teoretycznej Wydziału Fizyki UW. Wcześniej, bo w latach 2002-2003 pełnił funkcję prezesa Koła Matematyczno-Przyrodniczego Studentów UJ, a w okresie 01.2008-06.2008 jako przedstawiciel doktorantów był członkiem Rady Instytutu Fizyki UJ.

Był też współorganizatorem trzech międzynarodowych konferencji naukowych (w Krakowie w 2016 r. oraz w Hamburgu i w Barcelonie w 2017 r.) i był członkiem lokalnych komitetów organizacyjnych na trzech innych konferencjach (w Krakowie w 2008 r. oraz w Menlo Park w latach 2013 i 2014).

Podsumowując stwierdzam, że w moim przekonaniu osiągnięcie naukowe w postaci cyklu publikacji pt. „*Propagacja orbitonu w antyferromagnetyku*” oraz pozostałe dokonania dra Krzysztofa Wohlfelda uzyskane przez niego po otrzymaniu stopnia doktora wnoszą istotny wkład w rozwój teorii materii skondensowanej. Natomiast z przedstawionej mi dokumentacji oraz osobistej obserwacji działalności Habilitanta wynika, że wykazuje się on istotną aktywnością przede wszystkim naukową, ale również popularyzatorską i organizacyjną.

Biorąc pod uwagę dorobek naukowy oraz wszystkie inne przedstawione tu aspekty działalności dra Krzysztofa Wohlfelda uważam, że spełnione są wymogi Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym, dlatego wnioskuję o dopuszczenie dra Krzysztofa Wohlfelda do dalszych etapów postępowania mającego na celu nadanie mu stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk fizycznych.

  
Romuald Lemański