

prof. dr hab. Tomasz Kostyrko  
Wydział Fizyki UAM

Poznań, 20 sierpnia 2018

**Ocena rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego doktora  
Krzysztofa Wohlfelda w związku z postępowaniem o nadanie Mu  
stopnia doktora habilitowanego nauk fizycznych**

Dr Krzysztof Wohlfeld uzyskał tytuł magistra na Uniwersytecie Jagiellońskim w 2005 r. na podstawie rozprawy pt.: "Double exchange model for degenerate  $t_{2g}$  orbitals", a stopień doktora na podstawie rozprawy: "Beyond the standard t-J model", obronionej także na UJ w 2009 r. Jego promotorem w obu przypadkach był prof. dr hab. Andrzej M. Oleś.

*Formalny opis pracy habilitacyjnej.*

Jako swoje osiągnięcie naukowe, podlegające ocenie w związku z Ustawą o stopniach i tytule naukowym dr Wohlfeld wskazał, zgodnie z Art.16.2 Ustawy, jednotematyczny cykl 8 prac [H1-H8], opublikowanych w latach 2011-2016 pod wspólnym tytułem: "Propagacja orbitonu w antyferromagnetyku". Jedna z prac cyklu opublikowana została w czasopiśmie Nature, trzy w Physical Review Letters, dwie w Physical Review B, jedna w Acta Physica Polonica A oraz jedna w Journal of Physics: Conference Series. Poza dwoma ostatnimi z wymienionych, czasopisma te posiadają bardzo wysoki (Nature, Physical Review Letters) lub wysoki (Physical Review B) czynnik wpływu.

Wszystkie prace cyklu są wspólnym dziełem co najmniej kilku autorów, przy czym w połowie prac cyklu nazwisko Habilitanta znajduje się na pierwszym miejscu listy autorów. Ocena wkładu dr. Wohlfelda wymaga więc analizy 12 oświadczeń współpracowników Habilitanta. Pewną pomocą może być też zawarty w wykazie osiągnięć Habilitanta dość oryginalny algorytm pozwalający na procentowe określenie jego własnego udziału w części teoretycznej prac, zgodnie z którym mieścił się on w przedziale 50-70%, co można by uznać za spełnienie zwyczajowych i ustawowych wymagań o znacznym lub dominującym udziale Habilitanta w pracach wieloautorских. W większości prac dr Wohlfeld określa jako dominujący swój udział w sformułowaniu problemu lub wybraniu metody jego analizy. Poza tym wykonywał lub nadzorował - jak podaje - obliczenia analityczne i adaptował je do analizy numerycznej, a następnie wносił również przeważający wkład w redakcję artykułów. Obliczenia numeryczne, takie jak diagonalizacje Hamiltonianów, obliczenia przy użyciu klastrowego rachunku zaburzeń i obliczenia przy pomocy metod chemii kwantowej, były w tych pracach wykonywane zwykle przez współpracowników Habilitanta (Nishimoto,

Chen, Hozoi, Plotnikova, Trinckauf, Koepernik). Spośród wkładów pozostałych pracowników szczególnie istotna wydaje się zwłaszcza rola prof. van der Brinka, która polegała przede wszystkim na nadzorowaniu całości wykonania badań w 5 pracach (spośród 6 wspólnych) oraz na udziale w opracowaniu głównych koncepcji badań. Pozostali współautorzy (Khaliullin, Daghofer, Haverkort, Veenendaal, Devereaux) jako swój udział podają zwykle udział w dyskusji i redakcji artykułu. Sens tych oświadczeń współautorskich wydaje mi się dość zgodny z oceną wkładu Habilitanta, wobec czego zdecydowałem się uznać, że udział dr. Wohlfelda w pracach cyklu spełnia zwyczajowe i ustawowe kryteria stawiane pracom habilitacyjnym.

Przedmiotem rozprawy dr. Wohlfelda jest teoretyczna analiza wzbudzeń orbitalnych w izolatorach: złożonych tlenkach metali przejściowych, z uporządkowaniem antyferromagnetycznym. Główny nacisk w pracach położono na układy niskowymiarowe: jednowymiarowe, drabinkowe i dwuwymiarowe, w których znajdowano dającą się eksperymentalnie zaobserwować dyspersję wzbudzeń. Własności wyliczonych funkcji spektralnych interpretowano m.in. w ramach koncepcji separacji spinowo-orbitalnej. W części prac zinterpretowano szczegółowo wyniki eksperymentalne otrzymane przy pomocy rezonansowego nieelastycznego rozpraszania rentgenowskiego (RIXS), pozwalające na identyfikację wzbudzeń orbitalnych w otrzymanym widmie. Jak zatem wynika z tego skrótego omówienia, zawartość przedstawionego cyklu prac mieści się w ramach jednej, dość precyzyjnie określonej tytułem, tematyki. Na tej podstawie, uwzględniając także omówione wyżej oświadczenia współautorów prac cyklu habilitacyjnego uznaję, że rozprawa dr. Wohlfelda spełnia warunki określone w Ustawie o stopniach i tytule naukowym, jako podstawa do ubiegania się przez niego o stopień doktora habilitowanego.

*Dyskusja wyników uzyskanych w pracy habilitacyjnej.*

Ocenianą rozprawę można omawiać w kontekście szerokiej dziedziny badań magnetycznych związków metali przejściowych o własnościach izolacyjnych, w których zasadnicze znaczenie mają silne korelacje elektronowe oraz degeneracja orbitalna. W układach tych dużą rolę odgrywa zjawisko Jahna-Tellera, prowadzące do usunięcia tej degeneracji kosztem redukcji symetrii otoczenia jonów metali przejściowych. Współdziałanie orbitalnych i spinowych stopni swobody prowadzi do występowania złożonych uporządkowań spinowych i orbitalnych i bogactwa obserwowanych przejść fazowych. Dość wczesne podsumowanie tego obszaru badań można znaleźć w pracach Kugela i Khomskii-ego z przełomu lat 70-80 XX w., gdzie sformułowano także podstawowe modele teoretyczne do opisu uporządkowań magnetycznych i orbitalnych. Początkowo koncentrowano się głównie na opisie uporządkowań elektronowych, mniej uwagi poświęcając wzbudzeniom orbitalnym. Wynikało to z trudności

eksperymentalnych obserwacji tych wzbudzeń oraz z faktu, że zwykle oddzielone są one szczeliną energetyczną od stanu podstawowego i nie wnoszą istotnego wkładu do własności termodynamicznych w niskich temperaturach. Dopiero w końcu ubiegłego wieku można zaobserwować wyraźny wzrost zainteresowania tematyką wzbudzeń orbitalnych głównie dzięki lepszym możliwościom eksperymentu, a do często cytowanych prac teoretycznych w tym kontekście należą m.in. artykuły współautorstwa J. van der Brinka i A. M. Olesia. Problematyka wzbudzeń orbitalnych jest więc stosunkowo nowa a otrzymane wyniki mają szansę być uznane za oryginalne.

Spośród zawartych w rozprawie wyników i wniosków szczególnie ważne wydały mi się następujące osiągnięcia teoretyczne:

- Pokazanie w pracy [H1], że opis propagacji pojedynczego wzbudzenia orbitalnego w układzie opisanym modelem Kugela i Khomskii'ego, może być zmapowany na problem propagacji holonu w układzie opisanym modelem  $t - J$ . Model ten, jako powszechnie używany do opisu nadprzewodzących tlenków miedzi, został dość szczegółowo zbadany w ostatnich trzydziestu latach i fakt przeniesienia wniosków z tych badań na problem propagacji orbitonu znacznie ułatwia zrozumienie tego ostatniego zjawiska. W pracy [H1] dokonano numerycznych obliczeń ścisłych dla skończonego łańcucha i pokazano, że zależność dyspersyjna orbitonu odzwierciedla korelacje antyferromagnetyczne w układzie, czego nie da się opisać przy pomocy często wcześniej stosowanego przybliżenia pola średniego. Używając wymienionego mapowania opisano zjawisko separacji spinowo-orbitalnej przez analogię do separacji spinonu i holonu w układzie jednowymiarowym (1D). Podobne obliczenia wykonano następnie w pracy [H3] dla układu 2D, gdzie ruch orbitonu okazał się utrudniony (w porównaniu do przypadku 1D) przez towarzyszące mu zjawisko powstawania frustracji w 2D uporządkowaniu antyferromagnetycznym (zjawisko znane z badań modeli nadprzewodzących tlenków miedzi).
- Osiągnięcia z pracy [H1] zostały wykorzystane w pracy [H2] do opisu separacji orbitonowo-spinonowej w 1D izolatorze  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$ , gdzie dokonano szczegółowej interpretacji wyników pomiarów RIXS. Pozwoliło to na potwierdzenie, po raz pierwszy w literaturze, występowania zjawiska separacji orbitonowo-spinonowej w omawianych układach. Model stanowiący podstawę tych obliczeń został wyprowadzony w pracy [H4] za pomocą procedury perturbacyjnej, dla której punkt wyjścia stanowił ogólny model układu oddziałujących elektronów w układzie wielopasmowym, dla którego parametry uzyskano z niezależnych obliczeń dokonanych w ramach teorii funkcjonału gęstości.

- W pracy [H5] dokonano interpretacji pomiarów RIXS widma wzbudzeń orbitalnych w układzie  $\text{CaCu}_2\text{O}_3$  o strukturze drabinkowej, uzyskując bardzo dobrą zgodność z pomiarami. W pracy tej użyto efektywnego modelu t-J i przedyskutowano szczegółowo zjawisko t.zw. frakcjonalizacji wzbudzenia (rozpadu wzbudzenia na niezależnie propagujące się wzbudzenia spinonowe i orbitalne), dla jednego z istotnych w układzie orbitali, podczas gdy dla drugiego z analizowanych, ze względu na szczególną budowę układu, zachowanie było charakterystyczne dla układu 2D.
- W pracy [H6] zbadano wpływ pola krystalicznego na własności wzbudzeń spinowych i orbitalnych opisanych modelem Kugela - Khomskii'ego w 1D. Pole obniża symetrię oryginalnego modelu z  $\text{SU}(4)$  do  $\text{SU}(2)$ . W zastosowaniu do tego modelu opracowano podejścia opisujące ewolucję układu ze wzrostem pola krystalicznego. Analityczne obliczenia dokonano metodą pola średniego *large-N*, zweryfikowaną za pomocą obliczenia klastrowej metody perturbacyjnej (metodę analityczną oceniono następnie w zastosowaniu do układu spinów w polu magnetycznym w pracy [H7]).
- W pracy zbadano model do opisu wzbudzeń ekscytonowych w układzie z silnym sprzężeniem spin-orbita oraz z oddziaływaniem Jahna-Tellera. Zbadano wzbudzenia w tym modelu na skończonej sieci 2D za pomocą samozgodnego przybliżenia Borna i pokazano występowanie minimum w punkcie  $\Gamma$ , co zgadzało się z zachowaniem zaobserwowanym w tlenku strontowo-irydowym, wcześniej niewyjaśnionym przy uwzględnieniu oddziaływania nadwymiany.

*Ocena pracy habilitacyjnej: podsumowanie.*

Oceniam, że przedstawiona rozprawa habilitacyjna dr. Wohlfelda prezentuje wysoki poziom naukowy, zawiera szereg wniosków aktualnych i mających znaczenie fundamentalne dla fizyki układów silnie skorelowanych elektronów i fizyki magnetyzmu. Udział dr. Wohlfelda w pracach wieloautorskich składających się na rozprawę miał zasadnicze znaczenie dla interpretacji pomiarów lub sformułowania głównych koncepcji teoretycznych. Prace te były już szeroko cytowane przez niezależnych autorów<sup>1</sup>: łącznie 167 razy, z czego ponad połowa cytowań (96) przypada na pracę [H2].

*Ocena całkowitego dorobku naukowego Habilitanta.*

Całkowity dorobek naukowy dr. Wohlfelda oceniam jako bardzo dobry jakościowo. Oprócz prac składających się na rozprawę, znajdują się w nim jeszcze 22 prace z listy

<sup>1</sup>zgodnie z bazą SCOPUS, dane z lipca 2018 r.

JCR<sup>2</sup>, z czego 15 powstało po uzyskaniu przez niego stopnia doktora. W dorobku Habilitanta są także prace całkowicie samodzielne (5), choć są to tylko publikacje pokonferencyjne w AIP: Conf. Proc. Wśród prac z jego dorobku po doktoracie na szczególną uwagę zasługuje cykl prac rozwijających teorię RIXS (dwie prace w Phys. Rev. Lett. i dwie w Phys. Rev. X) z lat 2012-2016. Są to publikacje już dość dobrze cytowane (38 cytowań niezależnych). Warto jeszcze tu zauważyć dwie prace w Nature Communications, które dotyczyły kolektywnych wzbudzeń spinowych w układach silnie skorelowanych elektronów. W sumie prace Habilitanta uzyskały do tej pory 411 niezależnych cytowań<sup>3</sup>, a jego indeks Hirscha osiągnął wartość 12. Według mojej oceny, są to wartości znacznie powyżej średniej dla kandydata do stopnia doktora habilitowanego, choć oczywiście jest, że składają się na nie w dużej mierze także wyniki pracy i prestiż wielu współpracowników Habilitanta.

W dorobku naukowym Habilitanta znajduje się też bardzo znaczna ilość jego wystąpień na konferencjach. Uczestniczył w nich z referatem: 40 razy, lub posterem: 13 razy, w tym 19 razy było to wystąpienie na zaproszenie (głównie na warsztatach naukowych). Dr Wohlfeld brał kilkakrotnie (5 razy) udział w realizacji projektów badawczych (KBN, NCN i FNP) jako wykonawca, ponadto jest kierownikiem obecnie realizowanego grantu badawczego Sonata Bis. Habilitant kilkakrotnie (7 razy) uczestniczył stażach naukowych. Odbił m.in. wielomiesięczne staże w Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden, oraz Stanford Institute for Materials and Energy Sciences.

Dr Wohlfeld pełnił funkcję recenzenta w 6 czasopismach naukowych, wykonując do tej pory 41 recenzji. Recenzował prace wysłane m.in. do Phys. Rev. B (25 razy), Phys. Rev. Lett. (10 razy) a także dla Nature Communications (3 razy).

*Ocena dorobku dydaktycznego, organizacyjnego i popularyzatorskiego Habilitanta.* Dr Wohlfeld posiada istotny dorobek dydaktyczny. Prowadził w latach 2015-2017 kilka wykładów kursowych wraz z ćwiczeniami od momentu zatrudnienia na UW. Kilkakrotnie sprawował opiekę nad studentami, pełnił także (3 razy) funkcję promotora licencjata i magistranta. Ponadto dwukrotnie pełnił funkcję promotora pomocniczego. Współuczestniczył także (4 razy) w opiece nad doktorantami w instytucjach zagranicznych podczas swoich staży naukowych. Był też dwukrotnie recenzentem w przewodach doktorskich za granicą.

Habilitant prowadził kilkakrotnie wykłady i referaty o charakterze popularyzatorskim m.in. dla uczniów liceów i na festiwalach nauki w Polsce i w Dreźnie. Przedstawiał też własne projekty badawcze w sposób dostępny dla specjalistów z

---

<sup>2</sup>JCR: Journal Citation Reports

<sup>3</sup>według bazy Web of Science

innych dziedzin nauki na spotkaniach w Polsce i w Niemczech.

Do jego dorobku organizacyjnego można zaliczyć udział w komitetach organizacyjnych konferencji naukowych w kraju i za granicą (6 razy).

*Podsumowanie dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego Habilitanta.*  
Uważam, że dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny dr. Wohlfelda uzyskany po doktoracie jest zupełnie wystarczający, jak na zwyczajowe wymagania stawiane kandydatowi na stopień doktora habilitowanego. Współuczestniczył on w uzyskaniu wartościowych wyników o charakterze fundamentalnym z obszaru fizyki układów skorelowanych elektronów, wykonując złożone obliczenia analityczne. Godną podkreślenia jest umiejętność jego współpracy w ramach dużych grup łączących teoretyków i eksperymentatorów, co wymaga szczegółowego zrozumienia metod eksperymentalnych. Habilitant uzyskał też wyraźne uznanie w skali międzynarodowej, potwierdzone dużą ilością referatów na zaproszenie, zlecaniem mu recenzji w prestiżowych czasopismach naukowych oraz powierzaniem opieki nad doktorantami w instytucjach zagranicznych. Jak wynika z wymienionych wyżej jego osiągnięć dr. Wohlfeld jest też dobrze przygotowany do pełnienia funkcji kierownika zespołów badawczych oraz sprawowania opieki promotorskiej, czyli głównych funkcji samodzielnego pracownika nauki.

*Podsumowanie i wniosek końcowy.*

Podsumowując omówione osiągnięcia Habilitanta uważam, że wartość rozprawy habilitacyjnej i całkowitego dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego dr. Krzysztofa Wohlfelda spełniają warunki określone przez Ustawę o tytule i stopniach naukowych i wnoszę o dopuszczenie Kandydata do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

*Tomasz K. Kostyrko*

prof. dr hab. Tomasz Kostyrko