

Wpłynęło dnia 16.01.2015
L. dz. 3/WFT/MSISN/2015
Zał. _____

Kraków, dn. 12 grudnia 2014 r.



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr inż. Macieja Łuszczka z Wydziału
Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej,
zatytułowanej: „Obliczenia z zasad pierwszych struktury elektronowej
wybranych związków nadprzewodzących z rodziny $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$
(Re – atom ziem rzadkich)”**

Instytut Fizyki
im.

Mariana Smoluchowskiego

Pan dr inż. Maciej Łuszczek obronił rozprawę doktorską zatytułowaną „Wzrost kryształów oraz wybrane własności transportowe w układzie tlenkowym Pr-Ba-Cu-O” w 1999 r. pod kierunkiem Prof. dr hab. inż. Wojciecha Sadowskiego jako promotora. Jest zatrudniony na stanowisku adiunkta na macierzystym Wydziale od 1 stycznia 2000 r. W skład rozprawy habilitacyjnej wchodzi 7 prac, z których 5 jest pracami monoautorskimi: 3 opublikowane w *Phys. Stat. Sol. (b)*, 2 w *Physica C- Superconductivity and its Applications*, jedna w czasopiśmie *Defect and Diffusion Forum* oraz jedna jako rozdział w monografii: *Superconductivity: Theory, Materials, and Applications* (Nova Science Publishers, New York, 2012). W dwóch pracach opublikowanych wspólnie z dr inż. Robertem Laskowskim, oświadczenie współautora nie pozostawia wątpliwości co do wiodącego wkładu habilitanta. Wszystkie prace wchodzące w skład rozprawy habilitacyjnej dotyczą obliczeń z pierwszych zasad zastosowanych do tlenkowych nadprzewodników wysokotemperaturowych typu „123” z różnymi jonami ziem rzadkich. Przedstawiają wyniki oryginalne autora i mogą zatem stanowić przedmiot rozprawy habilitacyjnej. Po scharakteryzowaniu dorobku naukowego autora wg. danych bibliometrycznych przejdę do omówienia dokładniejszego prac stanowiących rozprawę.

Zakład Teorii Materii

Skondensowanej i Nanofizyk

Kierownik Zakładu

Prof. dr hab. Józef Spalek

e-mail: ufspalek@if.uj.edu.p

tel. (sekr): 12 664-45-62

W swej karierze akademickiej habilitant opublikował w sumie 17 prac. Jego liczba cytowań (bez autocytowań) wynosi około 60, a HI 5. W całej swojej karierze zajmował się syntezą i badaniami własności fizycznych nadprzewodników wysokotemperaturowych z różnymi jonami ziem rzadkich, a w rozprawie habilitacyjnej obliczeniami *ab initio*. Opublikował też jako autor lub współautor 5 prac w opracowaniach monograficznych krajowych i zagranicznych spoza tzw. listy filadelfijskiej. Na uwagę w ramach tej aktywności zasługuje 33-stronnicowe opracowanie zatytułowane: „*Structural and electronic properties of some intriguing (rare-earth) $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ compounds*” w monografii *Recent Developments in Physics* (wyd. Transworld Research Network, Kerala, Indie, vol. 5, Part I, str. 463-495, 2004). Kierował także jednym grantem badawczym przyznany przez KBN oraz jednym grantem obliczeniowym przy-

adres IF UJ:

ul. St. Łojasiewicza 11

PL 30-348 Kraków

tel. +48(12) 664-47-03

fax +48(12) 664-49-06

e-mail: fizyka@uj.edu.pl



UNIwersytet
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Instytut Fizyki

im.

Mariana Smoluchowskiego

Zakład Teorii Materii

Skondensowanej i Nanofizyki

Kierownik Zakładu

Prof. dr hab. Józef Spałek

e-mail: ufspalek@if.uj.edu.pl

tel. (sekr): 12 664-45-62

adres IF UJ:

ul. St. Łojasiewicza 11

PL 30-348 Kraków

tel. +48(12) 664-47-03

fax +48(12) 664-49-06

e-mail: fizyka@uj.edu.pl

znanym przez Centrum Obliczeniowe Trójmiejskiej Sieci Akademickiej. Za swoje prace otrzymał 3-krotnie Nagrodę Rektora Politechniki Gdańskiej I i II stopnia (w tym raz indywidualną II stopnia za osiągnięcia w doktoracie). Habilitant wygłosił 5 komunikatów z własnych prac oraz był współautorem 14 innych komunikatów, w tym dwóch wygłoszonych na konferencjach naukowych, zagranicznych (Chiny, USA). Tak więc, pod względem ilościowym dorobek całociowy jest dostateczny do tego, że habilitant może być uważany jako fizyk gotowy do samodzielności naukowej. Jedynym minusem jest okoliczność, że habilitant był opiekunem tylko jednej pracy inżynierskiej.

We wniosku nie znalazłem informacji o wypromowanych magistratach czy ko-promotorstwie rozprawy doktorskiej. Mam nadzieję, że habilitant będzie bardziej aktywny pod tym względem w najbliższej przyszłości, gdyż posiada dość wszechstronne podejście do pracy naukowej: przeszedł drogę od syntezy materiałów, poprzez badania eksperymentalne własności fizycznych, aż do obliczeń struktury elektronowej i jej interpretacji. Tym bardziej, że habilitant prowadzi także ćwiczenia rachunkowe i zajęcia laboratoryjne z fizyki na wstępnych latach, gdzie można pozyskać studentów do pracy naukowej. Dobrze, że dr Łuszczek prowadzi także wykłady dla wydziałów technicznych swojej uczelni. Oznacza to, że jest przygotowany do takich zajęć, które z pewnością powinien prowadzić jako pracownik samodzielny naukowo.

Przechodząc do oceny merytorycznej rozprawy habilitacyjnej (6 prac oryginalnych plus jeden krótki rozdział w opracowaniu książkowym (monografia)) to pierwsze prace autora (Phys. Stat. Sol. (b)) **230**, R1-R3 (2002); *ibid.* **239**, 361-366 (2003); Defect and Diffusion Forum **242-244**, 95-106 (2005)) dotyczą obliczeń struktury elektronowej materiałów tlenkowych $\text{REBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ($\text{RE} = \text{Y}, \text{Pr}, \text{Dy}, \text{Nd}, \text{Ce}$) w podejściu lokalnego funkcjonału gęstości używając metody LAPW (*linear augmented plane wave method*) w przybliżeniu CGA (*generalized gradient approximation*) dla tego potencjału. W trzeciej z nich autor dodatkowo liczy stany z defektem (np. atomu Pr w pozycji Ba). Jako wynik w tych pracach otrzymuje oprócz struktury pasmowej także tzw. parcjalne gęstości stanów zaindukowane przez lokalne stany tlenów czy ziemi rzadkiej. Wyniki tego typu były prezentowane wielokrotnie w literaturze światowej i tutaj autor miał bardzo silną konkurencję, zwłaszcza, że używał tutaj standardowego dzisiaj już pakietu programów *wien 2k*. Dodatkowo, metodyka ta jest niedokładna z dwóch powodów. Po pierwsze, jony ziem rzadkich, zwłaszcza Nd czy Gd, posiadają zlokalizowane momenty magnetyczne na powłokach $4f$, a do tego jakkolwiek metoda typu LDA jest niewystarczająca. Po drugie, zlokalizowane momenty magnetyczne $4f$ jonów ziem rzadkich są w wielu z tych związków uporządkowane antyferromagnetycznie i ich porządek współistnieje z nadprzewodnictwem wysokotemperaturowym, za co z kolei są odpowiedzialne



UNIwersytet
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

stany zlokalizowane typu $3d-2p$, opisujące elektrony ulokowane w odseparowanych od tych momentów płaszczyznach miedziowo-tlenowych. Ale dodatkowo, te oddzielone stany typu $3d$ pochodzące od obecności jonów Cu, są sprzężone między sobą bardzo silnym oddziaływaniem z całą nadwymianą rzędu 1500-2000 K. Z tych powodów, metoda LDA musi być zawodna.

Ulepszeniem metody stosowanej w trzech powyższych pracach jest zastosowanie metody LDA+U (w przypadku prac autora jest to metoda GGA + U), gdzie zaimplementowano oddziaływanie typu Hubbarda do opisu stanów $4f$ ziemi rzadkiej. Otrzymano w ten sposób wiele ciekawych wyników dotyczących dodatkowo rozkładu lokalnego ładunku (por. Physica C **469**, 1892-97 (2009); Phys. Stat. Sol. B **247**, 104-108 (2010); Physica C **471**, 29-34 (2011)). Jednakże, także do tej metody mam kilka uwag krytycznych. Po pierwsze, elektrony $3d$ w płaszczyznach miedziowo-tlenowych są także silnie skorelowane i w związku z tym metoda LDA+U powinna być zastosowana także do nich. Taka sytuacja ma miejsce dla kanonicznego związku $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, gdzie z dobrym przybliżeniem możemy uważać, że na jonie Y^{3+} obsadzenie stanów $4f$ jest praktycznie zerowe, a układ jest dalej silnie skorelowany przez obecność elektronów $3d$, gdyż dla układu $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ mamy stan izolatora Motta, który to materiał jest układem wyjściowym (parent compound) dla nadprzewodnika wysokotemperaturowego $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, gdzie $x \geq 0.35$. Mogę zrozumieć, że rolą obliczeń *ab initio* tego typu jest przestudiowanie uporządkowania antyferromagnetycznego jonów $4f$ i jest to bardzo ważna informacja. Jednakże, niewiele możemy się w ten sposób dowiedzieć na temat silnie skorelowanych stanów elektronowych płaszczyzn miedziowo-tlenowych. Nie są to jednak rachunki niepotrzebne, gdyż dostarczają wartości gołych (wyjściowych) parametrów takich jak całka hoppingu Blocha pomiędzy sąsiednimi stanami $3d$, wielkości hybrydyzacji stanów $3d-2p$ czy względnego położenia wyjściowych stanów $3d$ względem stanów tlenów. Takie zastosowanie wymaga jednak przeprowadzenia tzw., mappingu czy sprojektowania stanów pasmowych na modele typu t-J czy modele hybrydyzacyjne. Dopiero wtedy autor może podjąć się badań stanu nadprzewodzącego. Nietrywialną własnością jest także obliczenie wielkości całki nadwymiany, która z grubsza jest znana przynajmniej dla przypadku $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ czy dla $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Z tego ostatniego punktu widzenia obliczenia tych ostatnich nadprzewodników są wręcz modelowe, gdyż są to układy jednopłaszczyznowe, tj. bez łańcuchów, które utrudniają rachunki, a występują w nadprzewodnikach typu „123”. Na koniec, chciałbym napisać uwagę ogólną o metodzie LDA+U. Zawiera ona dość zasadniczy defekt. A mianowicie występuje w tej metodzie tzw. *defekt podwójnego liczenia* oddziaływania kulombowskiego. Ze względu na to, że metoda LDA+U jest metodą niesystematyczną z formalnego punktu widzenia, trudno oszacować do jakiego stopnia jest ona niedokładna. Ta uwaga nie jest krytyką prac autora,

Instytut Fizyki
im.

Mariana Smoluchowskiego

Zakład Teorii Materii

Skondensowanej i Nanofizyki

Kierownik Zakładu

Prof. dr hab. Józef Spalek

e-mail: ufspalek@if.uj.edu.pl

tel. (sekr): 12 664-45-62

adres IF UJ:

ul. St. Łojasiewicza 11

PL 30-348 Kraków

tel. +48(12) 664-47-03

fax +48(12) 664-49-06

e-mail: fizyka@uj.edu.pl



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

a raczej tej dość popularnej metody obliczeniowej w ogóle. Ma miejsce tutaj preferencja osobista recenzenta, który nie widzi jak na razie konkurencji tej metody dla modeli teoriopoloowych takich, jak model t-J, Hubbarda i ich rozszerzeń. Te ostatnie modele dają bowiem sensowną dyskusję przejść fazowych i kwantowych zjawisk krytycznych.

Podsumowując, prace autora zawierają solidne wyniki rachunkowe, jakkolwiek wyniki należy traktować jako jakościowe przy stosowaniu ich do konkretnych materiałów. Brakuje mi w bibliografii jakiegokolwiek odniesienia do modeli silnie skorelowanych elektronów, a one mają bardzo dobre sukcesy w opisie nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego i jego współistnienia z antyferromagnetyzmem czy stanem fali gęstości ładunku, występujących dla elektronów z płaszczyzn miedziowo-tlenowych. Takie spojrzenie poza prace ze swojej wąskiej specjalności na tym etapie kariery świadczą nie tylko o dobrym warsztacie, ale jest wręcz nieodzowne dla obiektywnego spojrzenia na swoje wyniki. Wydaje się, iż byłoby bardzo celowym połączyć wysiłki takich obliczeń z tym co proponują ludzie zajmujący się teorią takich układów z punktu widzenia silnie skorelowanych elektronów. Jesteśmy zbyt małym krajem, żeby sobie pozwolić na wycinkowe badania. Jest to zresztą apel do grup z drugiej strony badań teoretycznych, do których należy piszący te słowa.

W konkluzji, uważam, że przedstawiony dorobek wchodzący w skład rozprawy, a także inne prace habilitanta w zakresie technologii i badania własności fizycznych tych materiałów, stanowią wystarczający dorobek, świadczący o jego dojrzałości i samodzielności naukowej. W związku z tym stwierdzam, iż przedstawiona dokumentacja i dorobek habilitanta spełniają wymogi odpowiedniej ustawy o stopniach i tytule naukowym i wnioskuję o dopuszczenie do dalszych etapów tej procedury, w tym do kolokwium habilitacyjnego.

Józef Spałek
profesor zwyczajny nauk fizycznych

Instytut Fizyki

im.

Mariana Smoluchowskiego

Zakład Teorii Materii

Skondensowanej i Nanofizyki

Kierownik Zakładu

Prof. dr hab. Józef Spałek

e-mail: ufspalek@if.uj.edu.pl

tel. (sekr): 12 664-45-62

adres IF UJ:

ul. St. Łojasiewicza 11

PL 30-348 Kraków

tel. +48(12) 664-47-03

fax +48(12) 664-49-06

e-mail: fizyka@uj.edu.pl