

UNIwersytet Jagielloński
WYDZIAŁ FIZYKI, ASTRONOMII I INFORMATYKI STOSOWANEJ

Prof. zw. dr hab. Andrzej Michał Oleś

Ocena rozprawy habilitacyjnej
"New phases of the transition-metal oxides"
oraz dorobku naukowego Pana dra Carmine Autieri

Pan dr Carmine Autieri ukończył studia fizyki w Uniwersytecie w Salerno i uzyskał tytuł magistra fizyki w roku 2008. Stopień doktora uzyskał na podstawie rozprawy doktorskiej pt. *"Interplay of spin-orbital correlations and structural distortions in Ru- and Cr-based perovskite systems"*, wykonanej w grupie prof. Canio Noce i dra Mario Cuoco w Instytucie Fizyki w Salerno w roku 2012. Praca doktorska zastała znakomicie oceniona i uzyskała najwyższe oceny. Następnie przebywał na stażach podoktorskich: w grupie prof. Evy Pavarini w Jülich (Niemcy), w Seagate Company w Derry (UK), w grupie prof. B. Sanyala i prof. O. Eriksona w Uniwersytecie w Uppsali (Szwecja), oraz w grupie dra S. Picozzi w centrum badawczym SPIN-CNR w L'Aquila (Włochy). Od 1 czerwca 2018 roku jest zatrudniony w laboratorium MagTop, aktualnie wchodzącego w skład Instytutu Fizyki PAN w Warszawie.

Działalność naukowa p. dra C. Autieri, zwanego dalej Autorem, koncentruje się wokół zagadnień związanych z własnościami magnetycznymi perowskitów, warstw międzymetalicznych, heterostruktur, oraz nadprzewodników, a ostatnio również związków z silnym oddziaływaniem spin-orbita. Przeprowadził On szereg obliczeń struktur elektronowych metodą DFT przy wykorzystaniu pakietu VASP. Badania te doprowadziły do powstania prac na temat własności:

- heterostruktur $\text{Sr}_2\text{RuO}_4/\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$,
- heterostruktur ferromagnetycznych $\text{YMnO}_3\text{--La}_x\text{Sr}_{1-x}\text{MnO}_3$,
- układów na bazie SrRuO_3 oraz cienkich warstw,
- układów dwuwymiarowych SrIrO_3 z silnym oddziaływaniem spin-orbita, oraz
- tlenków chromu na podłożu BaTiO_3 oraz tetragonalnego Cr_2O_3 .

Rozprawa habilitacyjna dotyczy nowych faz tlenków metali przejściowych, które powstają w heterostrukturach lub na granicach złącz w układach silnie skorelowanych tlenków i w cienkich warstwach. Moją ocenę dorobku naukowego Habilitanta rozpocznę od dyskusji wyników merytorycznych uzyskanych przez Niego w pracach opublikowanych wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej.

Badania prowadzone przez p. dra Carmine Autieri doprowadziły do powstania cyklu siedmiu tematycznie ze sobą związanych prac, traktujących kompleksowo problem własności magnetycznych w wybranych tlenkach metali materiałach warstwowych lub krystalicznych izolatorach topologicznych. Nie ulega wątpliwości, że tak sformułowany problem badawczy jest oryginalny i interesujący. Wszystkie prace ukazały się w bardzo dobrych czasopiśmie o szerokim zasięgu, w tym w kolejności chronologicznej przyjętej przez Autora:

- [H1] — w prestiżowym czasopiśmie fizycznym w dziedzinie materii skondensowanej, *Physical Review B*;
- [H2] — w czasopiśmie europejskim *open access New Journal of Physics*;
- [H3] — w znanym czasopiśmie z grupy *Nature: Scientific Reports*;
- [H4] — w bardzo dobrym czasopiśmie na temat materii skondensowanej, *Journal of Physics: Condens. Matter*;
- [H5] — w wiodącym czasopiśmie fizycznym *Physical Review Letters*;
- [H6] — w bardzo dobrym czasopiśmie na temat nowych materiałów *Physical Review Materials*;
- [H7] — w prestiżowym czasopiśmie fizycznym w dziedzinie materii skondensowanej, *Physical Review B*.

Tym samym został spełniony warunek opublikowania pracy habilitacyjnej. Inne prace Autora są tematycznie słabiej związane z cyklem prac habilitacyjnych i stanowią cenny materiał uzupełniający, o czym szerzej poniżej.

Na wstępie warto podkreślić, że wśród prac składających się na habilitację praca [H4] jest monoautorska — jest to niewątpliwie duży sukces Habilitanta. Pozostałe sześć prac powstało w niezbyt licznych zespołach 2-13 osobowych, co w badaniach w fizyce jest obecnie zjawiskiem powszechnym. Uzyskanie liczących się wyników naukowych jest bowiem, szczególnie w fizyce eksperymentalnej, możliwe jedynie poprzez wspólny wysiłek dość licznej grupy badawczej, korzystającej z wysokiej jakości próbek wyprodukowanych przez specjalistów

oraz z nowoczesnej aparatury. Zwraca uwagę fakt, że za wyjątkiem prac [H1], [H2] i [H4] pozostałe zawierają obszerne części eksperymentalne. O wysokim poziomie tych prac i prezentowanych w nich wyników najlepiej świadczy fakt, że zostały one opublikowane w znanych czasopismach. Obowiązkiem recenzenta jest w tej sytuacji ustalenie, w jakim stopniu prace objęte rozprawą stanowią samodzielny dorobek naukowy Habilitanta. Jest to możliwe dzięki oświadczeniom współautorów dołączonym do dokumentacji przewodu habilitacyjnego.

Główny współautor części teoretycznej pracy [H5], prof. Marc Gabay, stwierdza: *"I declare that my contribution ... has been related to the theoretical analysis of the thickness weak localization ..., to the discussion of scientific results as well as to the writing the corresponding part of the paper."* Pozostałe oświadczenia podają zwykle dyskusję wyników oraz pracę nad treścią publikacji. Szereg współautorów koncentruje się na syntezie próbek lub wykonaniu pomiarów. Wszystkie osoby określają swój wkład w prace powstałe w większych zespołach jako niewielki i wynikający z podziału zadań zespołu, podając zwykle dyskusję uzyskanych wyników lub pracę nad treścią publikacji. Oświadczenia współautorów pozwalają mi stwierdzić, że: (i) prace wspólne wchodzące w skład rozprawy powstały przy istotnym wkładzie twórczym ze strony dra Autieri, oraz (ii) udział dra Autieri w obliczeniach, które doprowadziły do powstania wszystkich tych prac, był dominujący i wszystkie wyniki obliczeń stanowią jego oryginalny wkład do badań.

Ponadto, zwraca uwagę fakt, że w dwóch pracach wieloautorских składających się na habilitację Pan Autieri jest pierwszym autorem, natomiast w trzech innych, [H3], [H5] i [H7], jest drugim autorem w dość licznych grupach autorów prac. Świadczy to niewątpliwie o Jego dominującym wkładzie w wyniki uzyskane w tych pracach. Jedynie w pracy [H6] — Habilitant jest na czwartym miejscu, co można uzasadnić materiałowym charakterem tej pracy. Proponuję zinterpretować Jego obecność na liście jako potwierdzenie istotnego wkładu części teoretycznej przedstawionej przez Autora również i w tej pracy.

W tej sytuacji stwierdzam, że rozprawa habilitacyjna p. dra Carmine Autieri została opublikowana, a wszystkie siedem prac [H1]-[H7] wchodzących w skład rozprawy stanowią samodzielny dorobek naukowy Habilitanta. W związku z tym przedstawione osiągnięcie może być rozpatrywane jako podstawa do uzyskania przez Niego stopnia doktora habilitowanego.

Przejdę teraz do szczegółowej analizy wyników zawartych w pracach opublikowanych wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej, wymieniając najważniejsze wyniki i osiągnięcia Autora (cytowane numery [H1]–[H7] odnoszą się do prac **p1–p7** objętych rozprawą wg kolejności przyjętej w autoreferacie rozprawy, dołączonym przez Autora):

(1) Głównym wynikiem pracy [H1] jest podanie pełnego opisu struktury elektronowej heterowarstw $(\text{Sr}_2\text{RuO}_4)_l/(\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7)_n$. Przebadano wpływ złącza między strukturami na strukturę elektronową i wykazano, że istotne zmiany występują w obszarze niskoenergetycznym czyli w pobliżu powierzchni Fermiego. Istotne jest tu podanie opisu zmian struktury elektronowej przy pomocy efektywnych parametrów ciasnego wiązania dla pasm Ru. Ta pierwsza praca jest bardzo szczegółowa i dostarcza szeregu wartościowych informacji o badanych heterostrukturach.

(2) W pracy [H2] przebadano szczegółowo heterostruktury ferromagnetyczne $\text{YMnO}_3/\text{LSMO}$. Badania te przyniosły odkrycie nowej fazy ferromagnetycznego izolatora w YMnO_3 w pobliżu złącza. Nie jest ona obserwowana w kryształach YMnO_3 i wynika z geometrii heterostruktury. Ferromagnetyk znaleziony na złączu jest silnie anizotropowy. Wobec oświadczenia współautora uważam, że obszerna praca [H2] stanowi bardzo istotny sukces badań dra Autieri.

(3) W pracy [H3] podano analizę transportu w heterostrukturach $\text{SrRuO}_3/\text{SrTiO}_3$. Jest to ważne również z uwagi na możliwe zastosowania w spintronice. Praca ta zawiera nie tylko przewidywania teorii ale również część eksperymentalną. Obliczenia teoretyczne przeprowadzono jednak dla zbyt małych i nierealistycznych wartości parametrów $\{U, J_H\}$ dla Ru i dlatego otrzymane wyniki wydają się dość wstępne i niewystarczające. Przyjęta wartość wymiany Hunda $J_H = 0.05$ eV wydaje się zbyt niska, nie podano też cytatu z literatury. Tymczasem w niecytowanej tu pracy [L. Vagner, H. Jiong, and S. Biermann, *PRB* **86**, 165105 (2012)] wartości parametrów Kanamori $\{U, J_H\}$ są podane również dla Ru i dane te sugerują, że wyniki uzyskane przez Autora w pracy [H3] nie są ostateczne i wymagają uzupełnienia. Wartościowa byłaby też jakościowa dyskusja tego problemu.

(4) Dużym sukcesem Autora są wyniki badań przedstawione w pracy [H4]. Wykazano w niej, że w cienkich warstwach SrRuO_3 w fazie izolatora dla realistycznych wartości $U \simeq 5$ eV powstaje porządek antyferromagnetyczny typu-G współistniejący z porządkiem ferro-orbitalnym xy. Interesująca jest wyliczona zależność różnicy energii między fazami FM i AFM dla rosnącej liczby komórek elementarnych w warstwie na powierzchni.

Zdaniem recenzenta dyskusja wyników mogła być istotnie bogatsza poprzez podanie związku otrzymanych wyników z fenomenologicznymi regułami Goodenougha-Kanamoriego.

(5) Udział w zespole badawczym w pracy [H5] jest dużym osiągnięciem Autora – praca ta pokazuje własności SrIrO_3 oraz heterostruktur $\text{SrIrO}_3/\text{SrTiO}_3$. Obliczenia przeprowadzone przez Autora wykazały, że pojawianie się izolatora dla niezbyt dużej wartości $U = 1.5$ eV zależy od liczby warstw SrIrO_3 na podłożu SrTiO_3 . Tym samym wykazano, że SrIrO_3 może wystąpić w fazie izolatora w granicy dwóch wymiarów. Jednocześnie układ czterech warstw występuje w fazie semimetalicznej. Ten wynik teorii wyjaśnia eksperymenty przeprowadzone dla ultracienkich warstw SrIrO_3 .

(6) Kolejne dwie prace to nowe fazy w tlenkach metali przejściowych na bazie chromu. W pracy [H6] wykazano istotność oddziaływania lokalnego U dla stabilizacji przerwy na poziomie Fermiego i utrzymania izolatora w Cr_2O_3 . Mamy tu do czynienia z izolatorem nawet dla $U = 0$ ale wartość przerwy jest wtedy mała i wynosi 0.8 eV. Uwzględnienie U o wartości około 6 eV jest konieczne do poprawnego opisu obserwowanych własności tego związku. Nota bene, cytowana praca [28] została podana błędnie co świadczy o niezbyt starannym sprawdzeniu przez autorów pracy [H6] ostatecznej wersji przygotowanej do druku (*proof*).

(7) Obliczenia metodą DFT dra Autieri [H7] oraz przewidzenie antyferromagnetycznego stanu podstawowego w tetragonalnym Cr_2O_3 odegrały istotną rolę dla prowadzonych przez współautorów pracy [H7] badań eksperymentalnych. Autor wyznaczył oddziaływania wymienne w trzech nierównoważnych kierunkach i wykazał, że jedna z całek wymiany jest ferromagnetyczna a pozostałe dwie – antyferromagnetyczne. Stan antyferromagnetyczny został potwierdzony doświadczalnie a wyniki teoretyczne odegrały rolę stymulującą dla badań magnetotransportu w cienkich warstwach Pt w kontakcie z warstwami $t\text{-Cr}_2\text{O}_3$.

Reasumując, w pracach [H1]–[H7] przedstawiono szereg wyników szczegółowych a poziom ich prezentacji uważam za bardzo dobry. Wyniki obliczeń metodą DFT przeprowadzone przez dra Autieri z dużą starannością i przy dobrej znajomości metod obliczeniowych okazały się przydatne do interpretacji eksperymentów, a udział teoretyka w zespołach doświadczalno-teoretycznych odegrał jak się wydaje istotną rolę stymulującą.

Na zakończenie tej części jeszcze kilka uwag na temat autoreferatu p. dra Carmine Autieri, który stanowi podsumowanie najważniejszych wyników otrzymanych w pracy habilitacyjnej i zawartych w pracach opublikowanych. Jest to materiał o objętości około 33 stron i jako taki nie jest artykułem przeglądowym ale stanowi niezależne opracowanie syntetyczne przedstawionej w habilitacji tematyki. Z uwagi na to, że przedstawiony autoreferat jest materiałem nieopublikowanym, nie może on stanowić części rozprawy habilitacyjnej i nie będzie brany pod uwagę w końcowej ocenie. Niemniej jednak chciałbym poczynić tutaj kilka uwag:

(1) Najistotniejszą zaletą autoreferatu jest uporządkowanie wyników zawartych w pracach habilitacyjnych. Autor przedstawia w sposób zadowalający metody obliczeniowe a następnie omawia wyniki dotyczące przejścia metal-izolator w SrRuO_3 oraz SrIrO_3 . W kolejnym rozdziale są omówione supersieci tlenków rutenu. Dwa ostatnie rozdziały zawierają opis złącza tlenków oraz opis tetragonalnej fazy tlenku chromu. Takie syntetyczne podejście do omawianych zagadnień sprawia, że dobrze wyeksponowano faktyczne osiągnięcia Habilitanta, które są znaczne.

(2) Lista literatury wniosku (185 pozycji) jest obszerna i dobrze umiejscawia osiągnięcie habilitacyjne w aktualnej literaturze. W podsumowaniu Autor podaje najistotniejsze informacje, czyli, co zostało zrobione, na czym polegają istotne osiągnięcia rozprawy, oraz jakie ważne problemy zidentyfikowano lub rozwiązano.

(3) Wiele do życzenia pozostawia polska wersja autoreferatu habilitacyjnego dra Autieri. Zawiera one różne nieścisłości, które w istotny sposób zmniejszają czytelność tekstu. Zdziwienie budzi nienumerowana wstawka do autoreferatu napisana inną czcionką. Te braki formalne zostały zauważone ale nie wpływają one na moją ocenę samego osiągnięcia, którym jest cykl prac opublikowanych [H1]–[H7] i tylko on podlega ocenie. Tekst angielskojęzyczny należy moim zdaniem traktować jako podstawowy i jest to przewodnik po wynikach rozprawy. Wydaje się, że teksty w języku polskim służą wyłącznie spełnieniu wymagań formalnych, co w przypadku cudzoziemca (jak w tym przypadku) może oznaczać obniżenie standardów.

Podsumowując, w pracy habilitacyjnej otrzymano szereg nowych informacji o heterostrukturach, ich własnościach elektronowych i strukturalnych. Nie wszystkie osiągnięcia Autora byłem w stanie w pełni docenić, ponieważ sam nie prowadzę badań struktur elektronowych. Niemniej jednak jestem przekonany, że prace wykonane przez Habilitanta istotnie wzbogaciły wiedzę o badanych związkach z silnie skorelowanymi elektronami. Szkoda jednak, że dalsze perspektywy tego postępu nie zostały dokładniej omówione. Okazją do wzbogacenia podsumowania wykonanych badań byłoby podanie dalszych planów naukowych na zakończenie omówienia wyników rozprawy i wynikających z nich problemów badawczych, które powinny być przedmiotem dalszych badań.

Dorobek naukowy dra C. Autieri to również szereg innych prac nie objętych rozprawą habilitacyjną. Nie sposób omówić tutaj wszystkich wyników szczegółowych zawartych w tych pracach, które obejmują kilka zagadnień dotyczących tlenków o kilku oddziałujących warstwach zwykle wykazujących też własności magnetyczne. W dokumentacji brak niestety wspomnienia kilku prac, które Autor uważa za najważniejsze; również autoreferat takich prac wyraźnie nie wskazuje.

Tymczasem niektóre inne prowadzone wcześniej prace przyniosły też spory sukces, jak np. badania prowadzone wspólnie z grupą prof. Canio Noce w Uniwersytecie w Salerno. Chciałbym tutaj wymienić pracę dwuautorską [C. Autieri and C. Noce, *Phil. Mag.* **97**, 3276 (2017)], w której omówiono własności elektronowe, magnetyczne i nadprzewodzące CrAs. Przeanalizowano powierzchnię Fermiego i podano sugestię przejścia fazowego od stanu uporządkowanego magnetycznie do izotropowego stanu nadprzewodzącego pod wpływem ciśnienia.

Ambitna jest analiza przejść strukturalnych w KCrF_3 , związku będącym elektronową analogią bardzo znanego związku KCuF_3 Kugla-Khomskiego [C. Autieri, E. Koch, and Eva Pavarini, *Phys. Rev. B* **97**, 155109 (2014)]. Wykazano w niej, że mechanizm nadwymiany nie jest wystarczający do wyjaśnienia obserwowanego przejścia fazowego z fazy kubicznej do tetragonalnej w $T = 973$ K. Zwraca uwagę wyjaśnienie obserwowanego w eksperymencie przejścia pomiędzy strukturami tetragonalną i monokliniczną w wyniku zmiany objętości w obecności oddziaływań lokalnych $\propto U$. Wykazano, że to przejście strukturalne zależy silniej od mechanizmu wymiany Slatera niż od nadwymiany.

Łącznie pan dr C. Autieri brał udział w 41 publikacjach wg bazy danych *Web of Science* w okresie do 30 lipca 2020. Dostarczona mi do recenzji lista publikacji dra Autieri obejmuje 28 pozycji oprócz prac [H1]–[H7] składających się na rozprawę habilitacyjną), czyli łącznie:

— 35 publikacje, czyli prace oryginalne opublikowane w czasopismach recenzowanych o zasięgu międzynarodowym, w tym za wyjątkiem jednej po uzyskaniu stopnia doktora.

Oznacza to, że dorobek publikacyjny jest poważny i złożony prawie wyłącznie z prac w czasopismach. Warto podkreślić, że czasopisma są bardzo dobre; większość prac została opublikowana w najlepszych czasopismach, a mianowicie:

- 9 prac opublikowanych w *Physical Review B*,
- 1 praca w *Physical Review Letters*,
- 1 praca w *Europhysics Letters — EPL*,
- 3 prace w *Physical Review Materials*,
- 3 prace w *Scientific Reports*,
- 2 prace w *New Journal of Physics*, oraz
- 4 prace w *Journal of Physics: Condensed Matter*.

Dorobek ten, wraz z pracami opublikowanymi w innych czasopismach, jest łącznie jak na habilitację znakomity. Podsumowując uważam, że dorobek publikacyjny jest wystarczający i spełnia z nadmiarem zwyczajowe wymagania dla kandydatów do stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie fizyki.

Prace dra C. Autieri były cytowane wg *Web of Science* w okresie do 30 lipca 2020 łącznie 273 razy (164 bez autocytowań). Podobną liczbę cytowań 250 (145) podaje Autor we wniosku habilitacyjnym; rozbieżność wynika zapewne z okresu trwania procedury habilitacyjnej. Oznacza to średnio około 9 cytowań na pracę dla 31 prac opublikowanych do końca 2018 roku. Wskaźnik ten jest zatem nieco wyższy od średniej światowej około 7 liczonej na jedną publikację z fizyki wg tej samej bazy danych. Najliczniej cytowana praca [H5] objęta wnioskiem habilitacyjnym [D. J. Groenendijk, C. Autieri, *et al.*, Spin-Orbit Semimetal SrIrO_3 ..., *Phys. Rev. Letters* **119**, 256403 (2017)] uzyskała już 37 cytowań. Pozostałe prace habilitacyjne sprzed roku 2019 też były cytowane: praca [H1] — 18 razy; praca [H2] — 11 razy; praca [H3] — 11 razy; praca [H4] — 12 razy; praca [H6] — 8 razy. Pięć prac nie-habilitacyjnych zostało lepiej zauważonych w literaturze: C. Autieri and Canio Noce, *Phil. Mag.* **97**, 3276 (2017) — 15 cytowań; C. Autieri *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 224004 (2017) — 13 cytowań; oraz trzy prace cytowane po 12 razy: Amitesh Paul *et al.*, *App. Phys. Lett.* **105**, 022409 (2014); C. Autieri, E. Koch, and Eva Pavarini, *Phys. Rev. B* **89**, 155109 (2014); C. Autieri, M. Cuoco, and C. Noce, *Phys. Rev. B* **85**, 075126 (2012). Są to wszystko prace opublikowane od roku 2012 co wskazuje na aktualność poruszanej w nich problematyki. Biorąc pod uwagę fakt, że większość z tych prac powstała niedawno i ich obecne liczby cytowań są zapewne jeszcze dość odległe od wartości asymptotycznych, proponuję uznać wyniki dotyczące cytowań prac za bardzo dobre. Indeks Hirscha wynosi $h = 11$ i jest typowy na tym etapie kariery naukowej w fizyce.

Pan dr K. Autieri wygłosił dwa referaty zaproszone na konferencjach międzynarodowych: (1) Interna-

tional Conference on Superconductivity and Functional Oxides, SUPERFOX 2020, 10-12 February 2020, S. Margherita, Genova, Italy; (2) Workshop "Recent Developments in the Theory of Topological Systems", 12-13 December 2019, Lublin, Poland. Ponadto wygłosił ponad 10 innych referatów (oral) na konferencjach i workshopach międzynarodowych. Był też współorganizatorem dwóch konferencji międzynarodowych. W roku 2015 otrzymał projekt Marii Curie finansowany przez UE: "*New Materials for High Moment Poles and Shields*". Jest recenzentem prac naukowych w kilku czasopismach nie należących do grupy Physical Review.

Wszystkie podane powyżej okoliczności pozwalają mi stwierdzić, że, pomimo wymienionych tu drobnych uwag krytycznych, Pan dr Carmine Autieri uzyskał wartościowe wyniki w swojej pracy habilitacyjnej oraz posiada dobre przygotowanie do samodzielnej pracy naukowej. Jest On specjalistą w skali światowej w zakresie badań teoretycznych tlenków metali przejściowych o złożonych i konkurujących ze sobą typach uporządkowania lub strukturach. Dorobek naukowy dra Carmine Autieri jest wystarczający i spełnia przyjęte zwyczajowo standardowe wymagania dla kandydatów do stopnia doktora habilitowanego z fizyki, zarówno pod względem jakościowym jak i ilościowym.

Wnoszę o przyjęcie rozprawy i dopuszczenie Pana dra Carmine Autieri do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.



Andrzej Michał Oleś

Kraków, 5 sierpnia 2020 roku.