

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr inż. Sylwii Gutowskiej
zatytułowanej „Badanie struktury elektronowej, oddziaływania
elektron-fonon i nadprzewodnictwa materiałów zawierających
ciężkie pierwiastki”

Niniejsza rozprawa doktorska wykonana została w Katedrze Fizyki Materii Skondensowanej na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie pod kierunkiem promotorów dr hab. inż. Bartłomieja Wiendlochy, prof. AGH oraz prof. dr hab. inż. Tomasza Klimczuka.

Rozprawa przygotowana została w sposób klasyczny jako monograficzne opracowanie. Liczy 275 stron i podzielona została na 12 rozdziałów z wyraźnym wyszczególnieniem części zawierającej wstęp teoretyczny oraz części dotyczącej wyników przeprowadzonych badań. Na samym początku zaprezentowano cel i zawartość pracy, umieszczono także wykaz skrótów i oznaczeń. Pracę kończy obszerny dodatek, wykaz dorobku naukowego autorki oraz bibliografia zawierająca 223 pozycje, głównie prace z ostatnich lat opublikowane w czasopismach naukowych. Wśród literatury znajdują się siedem pozycji, których autorem lub współautorem jest pani Sylwia Gutowska z domu Gołąb. Struktura pracy jest przejrzysta z logicznym podziałem na rozdziały i podrozdziały, co znacznie ułatwia jej lekturę.

Cel rozprawy

Celem recenzowanej rozprawy było teoretyczne zbadanie struktury elektronowej, oddziaływania elektron-fonon i nadprzewodnictwa kilku różnych rodzin materiałów, zawierających ciężkie pierwiastki: związku binarnego LiBi, faz Lavesa SrIr_2 i SrRh_2 , stopu $\text{Pb}_{0.64}\text{Bi}_{0.36}$ oraz związków toru i ceru: ThIr_3 i CeIr_3 . Dla porównań i pełniejszej analizy uzyskanych wyników, przeprowadzono ponadto obliczenia dla NaBi oraz elementarnych metali Ir, Rh i Pb. Na podkreślenie zasługuje fakt, że omawiane badania teoretyczne były prowadzone równolegle we współpracy z grupami eksperymentalnymi realizującymi badania doświadczalne (Politechnika Gdańska, Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu oraz Uniwersytet w Princeton). Działanie takie pozwoliło w każdym przypadku na porównanie uzyskanych wyników teoretycznych z doświadczalnymi oraz stanowiło bazę do ich dalszej analizy.

Pani mgr inż. Sylwia Gutowska stworzyła trzy programy komputerowe do wizualizacji powierzchni Fermiego, wizualizacji fononów jako ruchu atomów



dr hab. inż. Artur P. Durajski
prof. PCz.

Politechnika Częstochowska
Katedra Fizyki

tel: +48 (34) 32-50-795
e-mail: artur.durajski@pcz.pl

w przestrzeni rzeczywistej oraz analizy stałych sieciowych. Na pochwałę zasługuje fakt, że owe programy są ogólnodostępne w repozytorium GitHub.

Treść rozprawy

Praca składa się z trzech części: wstępu teoretycznego, wyników badań oraz dodatku. W części I opisano teorię funkcjonału gęstości DFT, metody pseudopotencjału i fal płaskich oraz zlinearyzowanych dołączonych fal płaskich, zastosowane w obliczeniach struktury elektronowej. Następnie opisano perturbacyjną teorię funkcjonału gęstości DFPT, oddziaływanie elektron-fonon oraz teorię BCS nadprzewodnictwa. Dalsza część przedstawia samouzgodnioną teorię funkcjonału gęstości dla nadprzewodnictwa SCDFT oraz wprowadzenie w zagadnienia silnych korelacji elektronowych. Ostatni rozdział wprowadzenia teoretycznego opisuje pochodzenie poprawek relatywistycznych w strukturze elektronowej materiałów. Część I kończy opis używanych programów komputerowych.

Druga część rozprawy zawiera 4 rozdziały dotyczące wyników obliczeń badanych materiałów. Pierwszy rozdział przedstawia badania nad LiBi - związkiem krystalizującym w strukturze tetragonalnej z dystorsją strukturalną, którego temperatura krytyczna wynosi 2.5 K, a stała sprzężenia $\lambda = 0.66$. Celem badań było zbadanie wpływu dystorsji strukturalnej na własności elektronowe, fononowe oraz oddziaływanie elektron-fonon i nadprzewodnictwo, wraz z weryfikacją elektronowo-fononowego mechanizmu nadprzewodnictwa oraz roli oddziaływania spin-orbita. Badano również wpływ ciśnienia oraz efekt izotopowy, a także własności topologiczne LiBi w odniesieniu do siostrzanego układu NaBi.

Drugi rozdział przedstawia fazy Lavesa SrIr_2 ($T_c = 6.1$ K) i SrRh_2 ($T_c = 5.4$ K) o dość silnym sprzężeniu elektron-fonon, $\lambda \sim 1$, których struktura krystaliczna może być przedstawiona jako zmodyfikowana struktura *fcc* Ir i Rh. Celem badań było wyjaśnienie, w jaki sposób modyfikacja strukturalna prowadzi do silniejszego sprzężenia elektron-fonon oraz stosunkowo wysokiej wartości T_c w fazach Lavesa. Porównanie wyników dla związków zawierających izoelektronowe pierwiastki Rh i Ir, o różnej liczbie porządkowej, dostarczyło informacji na temat roli sprzężenia spin-orbita w obu materiałach. Wyjaśniono również, dlaczego wprowadzenie lżejszego atomu *M* w fazach Lavesa AM_2 prowadzi do obniżenia T_c .

Trzeci rozdział opisuje stop $\text{Pb}_{0.64}\text{Bi}_{0.36}$, który wykazuje wysoką wartość stałej sprzężenia elektron-fonon $\lambda = 2.05$ oraz nadprzewodnictwo o temperaturze krytycznej $T_c = 8.6$ K. Te wartości są wyższe niż w przypadku silnie sprzężonego ołowiu, którego T_c wynosi 7.2 K i $\lambda \simeq 1.5$. W stopie $\text{Pb}_{1-x}\text{Bi}_x$, przy wzroście *x* powyżej 30%, dochodzi do przejścia fazowego ze struktury *fcc* do *hcp*. W rozdziale poruszono zagadnienia związane z badaniem przyczyny tego przejścia oraz wpływu zmiany struktury krystalicznej, liczby elektronów i sprzężenia spin-orbita na strukturę elektronową i fononową oraz ich wpływ na siłę oddziaływania elektron-fonon i T_c . Przedstawiono także teoretyczne wyznaczenie struktury przerwy nadprzewodzącej stopu $\text{Pb}_{0.64}\text{Bi}_{0.36}$, która może wskazywać na wyjście poza jednoprzerwowe nadprzewodnictwo typu *s*. Obliczenia anizotropowych własności oddziaływania elektron-fonon oraz przerw nadprzewodzących wykonano za pomocą równań Eliashberga oraz SCDFT, w których uwzględniono bezpośredni wpływ oddziaływań kulombowskich na nadprzewodnictwo, co pozwala uniknąć pro-

blemu parametru Morela-Andersona stosowanego w standardowym podejściu z równaniami Eliashberga.

Czwarty rozdział dotyczy związków ThIr_3 i CeIr_3 , reprezentujących metale z bloku f i d . Parametr oddziaływania elektron-fonon został wyznaczony dla ThIr_3 i CeIr_3 przez analizę elektronowego ciepła właściwego. Wyniki sugerują występowanie oddziaływań elektron-paramagnon. Dla tej grupy materiałów nie udało się wykonać obliczeń fononowych, a wyznaczenie struktury elektronowej dla CeIr_3 wymagało użycia teorii DMFT ze względu na silną hybrydyzację orbitalu $4f$.

Obszerny dodatek zawiera wiele ciekawych informacji na temat pseudopotencjałów czy wyprowadzenia poprawek relatywistycznych.

Uwagi krytyczne

Rozprawa doktorska jest przemyślana i mocno powiązana z aktualnym kierunkiem badań w dziedzinie nadprzewodników, jednak należy zaznaczyć, że nie jest wolna od drobnych błędów przedstawionych poniżej:

1. W rozdziale 8.3 brak jest informacji na temat metod optymalizacji struktury krystalicznej badanych układów. Czy wykorzystano podejście quasi-Newtonowskie? Czy ewolucja powierzchni Fermiego LiBi w wyniku dystorsji może zostać powiązana z przejściem Lifshitz'a? Czym podyktowany był wybór ciśnienia 10 GPa podczas badania układu LiBi ? W jedynej cytowanej w rozdziale 8.8 publikacji [107] autorzy osiągnęli ciśnienia jedynie rzędu 4.5 GPa.
2. W rozdziale 9.6, w przypadku silnosprężeniowych układów SrIr_2 oraz SrRh_2 , gdzie $\lambda > 1$, z powodzeniem można by zastosować formalizm równań Eliashberga do wyznaczenia wartości T_c . Dlaczego ograniczono się jedynie do wzoru Allena-Dynesa?
3. W rozdziale 10.8.1 Autorka pisze, że „ μ^* nie jest tutaj zakładane, ponieważ jest obliczane metodą RPA”. Niestety nie mogłem doszukać się ile owa wyliczona wartość wynosi. Bardziej szczegółowe wyjaśnienie dotyczące tego tematu byłoby mile widziane ponieważ problem z arbitralnym doбором parametru μ^* (w obliczu braku danych doświadczalnych dla T_c) jest bardzo często spotykany.
4. Czy wraz ze wzrostem ciśnienia hydrostatycznego istnieją przesłanki o przejściach strukturalnych w czystym ołowiu tak jak to ma miejsce na przykład w wapniu? Czy energetycznie faworyzowana jest struktura fcc dla wszystkich ciśnień poniżej 15 GPa?

Autorka nie ustrzegła się również drobnych błędów edytorskich i językowych często mających swe źródło w tłumaczeniu pojęć fizycznych na język polski. Te drobne przeoczenia, oczywiście nie wpływają na moją wysoką ocenę pracy. Z drugiej strony, muszę podkreślić, że dysertacja zawiera bardzo dobrze przygotowane wykresy i tabele zarówno pod względem technicznym jak i kolorystycznym, które znacząco ułatwiają analizę porównawczą, podnoszą walory pracy i przyczyniają się do przejrzystego wyjaśnienia skomplikowanych zagadnień. Podobnie ma się sytuacja ze wzorami matematycznymi i wyprowadzeniami, które są wyjątkowo czytelne co jest istotne

