

**Recenzja rozprawy doktorskiej „Studium stanu nadprzewodzącego
w jedno- i wielopasmowych układach fizycznych
o parowaniu elektronowo-fononowym” autorstwa mgr inż. Ewy Anny Drzazgi**

Rozprawa doktorska mgr inż. Ewy Anny Drzazgi poświęcona jest analizie teoretycznej stanu nadprzewodzącego w wodorze atomowym i molekularnym oraz w wybranych związkach chemicznych opartych na węglu (B_2C oraz CaC_6) i zawierającym wodór związku B_2H_6 . Analiza ta jest oparta na przeprowadzonych przez Doktorantkę obliczeniach numerycznych w ramach formalizmu Eliashberga przy założeniu, że faza nadprzewodząca pojawia się jako efekt oddziaływania elektron-fonon. Właściwości omawianych układów fizycznych zostały opisane w zarówno ujęciu izotropowym jak i anizotropowym w zależności od charakteru oddziaływania parującego oraz korelacji elektronowych prowadzących do deparowania. Tytuł pracy „Studium stanu nadprzewodzącego w jedno- i wielopasmowych układach fizycznych o parowaniu elektronowo-fononowym” w pełni oddaje treść przedstawionej rozprawy.

Przedstawiona, licząca sto stron dysertacja składa się z siedmiu zasadniczych rozdziałów, wstępu, wniosków końcowych oraz obszernej, liczącej 127 pozycji bibliografii. Jeśli idzie o tę ostatnią, to zawiera ona przede wszystkim odnośniki do oryginalnych prac związanych z tematyką rozprawy. Należy podkreślić, że pojawiają się tu również najnowsze pozycje literatury światowej. W cytowanej literaturze, co jest oczywiste, znalazło się też 5 pozycji, których współautorką jest mgr inż. Drzazga. Wszak w pracach tych zaprezentowano rezultaty Doktorantki dyskutowane w niniejszej dysertacji. Uwzględnione w spisie literatury pozycje pokazują, że poruszana w dysertacji tematyka znajduje się w głównym nurcie światowych badań w zakresie nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego. W tym miejscu należy podkreślić, że w rozprawie umieszczono też spis dotychczasowych publikacji Autorki. Znajdziemy tam 7 artykułów opublikowanych w czasopiśmie z tzw. *listy filadelfijskiej*, i siedem rozdziałów w monografiach naukowych, których współautorką była Doktorantka. Ponadto, Autorka wymienia tu osiem nagród i wyróżnień, które otrzymała za swoje dotychczasowe osiągnięcia naukowe.

Rozdział pierwszy dysertacji ma na celu wprowadzenie czytelnika w zagadnienie omawiane w pracy. Na początku Autorka prezentuje tu podstawowe informacje związane ze zjawiskiem nadprzewodnictwa i historię badań w tej dziedzinie. Warto tu podkreślić, że Doktorantka wspomniała też o pionierskich pracach naszych rodaków Zygmunta Wróblewskiego i Karola Olszewskiego, związanych z fizyką niskich temperatur. W następnej części tego rozdziału Autorka koncentruje się na zaprezentowaniu podstaw teorii nadprzewodnictwa – teorii BCS oraz jedno i wielopasmowego formalizmu Eliashberga. Ponadto, w rozdziale tym opisano metody numeryczne wykorzystane przez Doktorantkę do uzyskania otrzymanych przez nią

wyników, diskutowanych w kolejnych rozdziałach zaprezentowanej dysertacji.

W krótkim rozdziale drugim zaprezentowano motywacje jakie kierowały Kandydatką przy wyborze tematyki badań. Z dydaktycznego punktu widzenia cenne jest tu odniesienie wybranej tematyki do bieżącego nurtu badań w dziedzinie nadprzewodnictwa oraz zestawienie badanych pierwiastków i związków chemicznych z czynnikami ułatwiającymi powstanie efektu nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego i powiązanie ich z odpowiednią metodą analizy badanego układu fizycznego.

Następnie (Rozdział 3) mgr inż. Ewa Anna Drzazga koncentruje swoje rozważania na pierwszym z omawianych związków a mianowicie na B_2C . Dla badanego układu, obliczono takie parametry jak ciepło właściwe (dla stanu nadprzewodzącego i normalnego), termodynamiczne pole krytyczne, parametr porządku. Wykazała, że co prawda wartości tych parametrów odbiegają od wartości przewidzianych w ramach teorii BCS, lecz rozbieżności te są niewielkie. Pokazała też, że znaleziona przez nią wartość temperatury krytycznej może się zmieniać od 13K do 20,4K, choć w pewnych warunkach może osiągnąć wartość maksymalną ok. 25K. Podkreślono też, że wartość T_c może ulec istotnemu zwiększeniu gdy blisko poziomu Fermiego (lub n nim samym) pojawi się osobliwość van Hove'a.

W rozdziale czwartym Autorka dyskutuje wpływ anizotropii oddziaływań typu elektron-elektron oraz elektron-fonon na własności fazy nadprzewodzącej dla związku CaC_6 . By obliczyć wartości poszukiwanych parametrów termodynamicznych Doktorantka użyła formalizmu Eliashberga zarówno w ramach podejścia izotropowego jak i anizotropowego (trójpasowego). W rozdziale tym wykazano, że fakt istnienia anizotropii w istotny sposób zmienia wartości parametru porządku. Autorka udowodniła też, że przebieg całkowitej, znormalizowanej gęstości stanów również istotnie zależy od tego czy mamy do czynienia z anizotropią czy też jest ona nieobecna. Dotyczy to też znalezionej przez Doktorantkę i diskutowanego w tym rozdziale parametru nieporządku. Kolejnym diskutowanym tu parametrem była masa efektywna elektronu. Wykazano, że znalezione przez Kandydatkę wartości tej masy są zgodne z formułą analityczną przedstawioną w rozdziale pierwszym, poświęconym zagadnieniom wstępnym. Widać, że obliczone wartości masy efektywnej dla różnych pasm przyjmują różne wartości, co jest tłumaczone jako efekt zmian wartości efektywnej stałej sprzężenia w zależności od diskutowanego pasma. Ponadto, wykazano na różnice wyników uzyskanych w ramach podejścia jedno- i wielopasowego.

Rozdział piąty poświęcony został dyskusji anizotropowego stanu nadprzewodzącego dla przypadku molekularnego, metalicznego wodoru znajdującego się pod działaniem ciśnienia 414 GPa. Ponieważ dla diskutowanej wartości ciśnienia 414 GPa istotną rolę w oddziaływaniach elektron-elektron i elektron-fonon gra obecność anizotropii, do przeprowadzonych obliczeń zastosowano formalizm trójpasowy. Dla takiego modelu znaleziono wartości masy efektywnej elektronu, całkowitą znormalizowaną funkcję gęstości stanów, termodynamiczne pole krytyczne, różnice pomiędzy wartościami energii swobodnej dla stanów nadprzewodzącego i normalnego oraz odpowiednie różnice wartości ciepła właściwego. Wykazano, że wartości bezwymiarowych stosunków parametrów nieporządku do temperatury krytycznej mogą być zasadniczo większe od wartości znalezionych w ramach modelu BCS. Ponadto pokazano, że wspomniane wyżej różnice energii i ciepła właściwego oraz termodynamiczne pole krytyczne, podawane w literaturze

przedmiotu są znacznie niedoszacowane. Związane jest to z faktem, że wyniki zaprezentowane w recenzowanej rozprawie zostały uzyskane na bazie trójpasmowego modelu Eliashberga podczas gdy niedoszacowane dane literaturowe znaleziono w oparciu o model jednopasmowy. Uważam, że wyniki te mają szczególną wartość stanowiąc istotny krok w badaniu konkretnych układów nadprzewodzących.

Kolejny (szósty) rozdział dysertacji dotyczy podobnego modelu do tego omawianego w części piątej ale tutaj założono, że ciśnienie wodoru jest ustalone powyżej ciśnienia dysocjacji molekularnej i wynosi 539GPa. W efekcie mamy tu do czynienia z wodorem w postaci atomowej a nie molekularnej. Ponieważ w dyskutowanej sytuacji nie mamy do czynienia z anizotropowością oddziaływań, obliczenia zostały przeprowadzone tu w ramach modelu jednopasmowego. Istotnym wynikiem jest pokazanie, że faza nadprzewodząca jest scharakteryzowana tu wysoką wartością temperatury krytycznej $T_c=357K$, znacząco wyższą niż dla przypadku ciśnienia nieznacznie niższego ($p\sim 500GPa$) gdy metaliczny wodór ulega przemianie w atomowy. W rozdziale tym pokazano też, że pozostałe znalezione przez Kandydatkę wartości parametrów termodynamicznych w istotny sposób odbiegają od przewidywań teorii BCS.

W ostatnim rozdziale pracy omówiono uzyskane przez Doktorantkę wyniki dotyczące bogatego w wodór związku B_2H_6 . Dla tego związku (znajdującego się pod ciśnieniem 360GPa) pokazano, że niezależnie od przyjętej wartości pseudopotencjału kulombowskiego temperatura krytyczna związku jest wysoka i mieści się w przedziale od 87K do 147K. Wykazano też, że podobnie jak to miało miejsce dla sytuacji omawianej w poprzednich rozdziałach, uzyskane wartości parametrów termodynamicznych znacznie odbiegają od wartości uzyskanych w ramach teorii BCS.

Można powiedzieć, że przedstawione w dysertacji wyniki są bardzo ciekawe nie tylko z punktu widzenia fizyka teoretyka, ale przede wszystkim ze względu na możliwe aplikacje eksperymentalne. Stanowi to o wartości uzyskanych przez Doktorantkę rezultatów. Mógłby się tu wprawdzie pojawić zarzut, że część z przedstawionych w rozprawie rezultatów stanowi proste powielenie wyników wcześniej otrzymanych, jednak należy pamiętać, że omawiane konkretne sytuacje fizyczne (układy zawierające wodór atomowy lub molekularny czy też związki chemiczne o różnym charakterze) wymagają różnego podejścia -wszak mamy to do czynienia z całym szeregiem różnych warunków wpływających na powstanie wysokotemperaturowego stanu nadprzewodzącego (por. tabela 2.1 w rozdziale II dysertacji). Uzyskując zaprezentowane w pracy wyniki mgr inż. Drzaga pokazała, że potrafi zastosować często skomplikowany aparat matematyczny i obliczeniowy oraz różne koncepcje fizyczne do rozwiązywania postawionych przed nią problemów. Czyni to z dużą biegłością i wyczuciem stosowanych metod, wykazując się przy tym dużą intuicją fizyczną.

Z obowiązku recenzenta muszę jednak wspomnieć o pewnych niedociągnięciach jakie znalazłem w przedstawionej rozprawie. Co prawda dysertacja została napisana w sposób jasny i klarowny, jednak znalazło się w niej kilka usterek. I tak, kilkakrotnie podając zakresy wartości pewnych parametrów Doktorantka podaje jako wartość dolną większą liczbę a jako wartość górną mniejszą, np. Na stronie 91 mamy: $T_c \in \langle 147; 87 \rangle K$, $R_d \in \langle 4,24; 3,98 \rangle$ czy też $R_c \in \langle 2,33; 2,17 \rangle$. Rozumiem, że takie przedstawienie może być związane z kontekstem w jakim podawane są te wartości, jednak moim zdaniem pewien porządek

matematyczny powinien być tu zachowany a wspomniany kontekst powinien zostać opisany słownie. Zastosowana forma przedstawienia wyników może być myląca dla osób, zwłaszcza dla czytelnika nie będącego specjalistą w omawianej dziedzinie. Na stronach 52 oraz 68 we wzorach określających gęstość stanów użyto jednostek opisanych w języku angielskim. Rozumiem, że takie oznaczenie jednostek można znaleźć w anglojęzycznej literaturze przedmiotu, jednak przedstawiona dysertacja została napisana w języku polskim i moim zdaniem zamiast nazwy *states* powinniśmy mieć np. termin „liczba stanów” a zamiast słowa *cell* powinno pojawić się określenie „komórka”. W pracy pojawiają się też pewne niedociągnięcia czy też nieścisłości językowe. Na przykład na stronie 57 doktorantka stwierdza, że „... w całym zakresie występowania stanu nadprzewodzącego anizotropia masy efektywnej elektronu jest bardzo wyraźnie widoczna.” Domyślam się, że jest to tzw. skrót myślowy, jednak trudno wyobrazić sobie anizotropię masy dla elektronu a z pewnością takowej anizotropii nie widać na omawianym w tym momencie wykresie (por. rys.4.15). Na stronie 90 Kandydatka stwierdza, że „... metaliczny molekularny wodór ulega przemianie w fazę atomową ...”. Wydaje się, że wodór nie może ulec przemianie w fazę. Możliwa jest zmiana jednej fazy na drugą. Należy jednak pamiętać, że wymienione tu niedociągnięcia są tylko drobnymi usterkami i pojawiają się sporadycznie i w niczym nie umniejszają one wartości pracy.

Podsumowując, mogę stwierdzić, że przedstawiona dysertacja autorstwa mgr inż. Ewy Anny Drzazgi spełnia z należytą starannością wszystkie wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Przedstawione w niej wyniki są nie tylko oryginalne ale też interesujące i wartościowe a sposób ich prezentacji jest jasny i czytelny. Kandydatka udowodniła, że potrafi z powodzeniem stosować opanowany przez nią warsztat badawczy jak i odpowiednio zaprezentować oraz zinterpretować otrzymane wyniki. Co zasługuje na podkreślenie, przedstawione przez Kandydkę rezultaty zostały już opublikowane w pięciu artykułach naukowych (ukazały się one drukiem w czasopiśmie z tzw. *listy filadelfijskiej*), dwóch kolejnych przygotowywanych do druku pracach oraz w siedmiu rozdziałach monografii naukowych. Ponadto, mgr inż. Drzazga jest współautorką dwóch innych artykułów zawierających wyniki nie uwzględnione w dysertacji, opublikowanych w renomowanym czasopiśmie *Physica C*. Należy tu podkreślić, że Doktorantka jest również laureatką ośmiu nagród i wyróżnień.

Stwierdzam, że dysertacja mgr inż. Ewy Anny Drzazgi spełnia nie tylko wszystkie ustawowe i zwyczajowe warunki stawiane pracom doktorskim ale również znacząco je przekracza. Dlatego też z pełnym przekonaniem wnioskuję o dopuszczeniu Kandydatki do dalszych etapów przewodu doktorskiego oraz wnioskuję o wyróżnienie złożonej przez nią rozprawy.



Wiesław Leoński