

Zielona Góra, 22.05.2018r.

dr hab. Mirosław R. Dudek, prof. UZ
Uniwersytet Zielonogórski
Wydział Fizyki i Astronomii
ul. Szafrana 4a, 65-516 Zielona Góra

Recenzja rozprawy doktorskiej pt. „*Stan nadprzewodzący w związkach o strukturze antyperowskitu*” napisanej przez Łukasza Heroka.

Przedstawiona do recenzji praca doktorska ma charakter pracy teoretycznej. Tematyka badawcza pracy mieści się w zakresie fizyki ciała stałego. Opiera się ona na czterech publikacjach, z których trzy związane są z badaniami właściwości termodynamicznych nadprzewodzących antyperowskitów a jedna dotyczy metody diagonalizacyjnej dla Hamiltonianu Hubbarda. Publikacje są cytowane. Należy podkreślić, że publikacja w czasopiśmie *Physica Scripta* otrzymała wyróżnienie IOPselect za jej dużą wartość naukową i za zawarty potencjał dla przyszłych badań. Rozprawa doktorska została napisana pod kierunkiem promotora dr hab. Radosława Szczęśniaka, prof. AJD oraz promotora pomocniczego Dr inż. Artura P. Durajskiego.

Zasadniczą część rozprawy doktorskiej stanowi sześć rozdziałów, z których dwa pierwsze wprowadzają w bardzo przystępny sposób odpowiednio w zagadnienia fizyki stanu nadprzewodzącego i historię badań nad układami o strukturze perowskitu i antyperowskitu w kontekście możliwości pojawienia się właściwości nadprzewodzących. Rozdział trzeci i czwarty dotyczy badań właściwości termodynamicznych stanu nadprzewodzącego w antyperowskitach SrPt_3P , MgCNi_3 oraz CdCNi_3 według formalizmu Eliashberga. Rozdział piąty stanowi dyskusję nt uogólnienia formalizmu Eliashberga o dodatkowe wyrazy w hamiltonianie Hubbarda użytego do modelowania oddziaływania elektron-fonon. Rozdział szósty jest wprowadzeniem do opisu środowiska numerycznego rozwijanego na potrzeby opisu układów fizycznych, które można opisać przy pomocy rozszerzonego hamiltonianu Hubbarda z rozdziału piątego.

We Wstępie sformułowane zostały główne cele rozprawy doktorskiej: zbadanie właściwości termodynamicznych stanu nadprzewodzącego w wybranych antyperowskitach przy pomocy równań Eliashberga, porównanie otrzymanych wyników z przewidywaniami teorii BCS, uogólnienie równań Eliashberga oraz budowa rdzenia wielopakietowego dla oprogramowania pozwalającego na analizę

stanu nadprzewodzącego. Cele te zostały osiągnięte. Jednocześnie przedstawiona rozprawa doktorska jest konstruktywną dyskusją stosowanych przybliżeń analitycznych oraz użytych metod numerycznych. Napisana jest bardzo przystępnie i ładnym językiem polskim. Zauważyłem kilka nieistotnych literówek. Natomiast doktorant za często używa określenia „klasyczny” dla metod i modeli w ich wersji oryginalnej, np. „klasyczna teoria BCS”, uogólnieniem klasycznych równań Eliashberga”, „klasyczny hamiltonian Hubbarda”, itp. Tego typu określenie pojawiło się nawet w tytule rozdziału 5. We wszystkich przypadkach, w których pojawia się taka konstrukcja zdaniowa usunąłbym tego typu określenia. Ta uwaga, w żaden sposób nie zmienia mojej bardzo dobrej opinii o tej rozprawie a wręcz zaskoczony jestem umiejętnością doktoranta przekazania bardzo specjalistycznej wiedzy teoretycznej nt opisu stanu nadprzewodzącego w języku równań Eliashberga czy też złożoności użytego oprogramowania i metod numerycznych w sposób bardzo prosty i zrozumiały. Świadczy to o bardzo dużej wiedzy doktoranta w zakresie prowadzonych badań.

Ocena poszczególnych rozdziałów rozprawy doktorskiej, przedstawienia w nich wyników badawczych i wagi otrzymanych wyników.

Rozdział 1.

Rozdział ten stanowi bardzo zgrabnie napisane wprowadzenie do opisu właściwości stanu nadprzewodzącego w ramach modelu BCS i jego uogólnienia poprzez teorię Eliashberga. Podoba mi się umieszczenie w podrozdziale 1.3.3 informacji o różnego rodzaju modyfikacjach kodu przez doktoranta w kierunku automatyzacji obliczeń. Świadczą one o tym, że oprogramowanie, które jest dorobkiem naukowym grupy badawczej prof. R. Szczeniaka wciąż jest ulepszane i doktorant bierze w tym procesie bardzo aktywny udział.

Rozdział 2.

W rozdziale przedstawiona została historia badań perowskitów i antyperowskitów, podstawowe pojęcia krystalograficzne z nimi związane oraz szereg bardzo interesujących właściwości fizycznych z nimi związanych, m.in. wykazywanie przez antyperowskity na bazie metali przejściowych możliwości pojawienia się dużego magnetooporu (zjawisko GMR), wykazywanie zerowej lub ujemnej rozszerzalności cieplnej w antyperowskitach na bazie manganu, czy też możliwość pojawienia się gigantycznej magnetostrykcji w związku CuNMn_3 . W tej rozprawie doktorskiej badane są możliwości pojawienia się właściwości nadprzewodzących antyperowskitów. Jest to tematyka badawcza która zaczyna bardzo intensywnie rozwijać się w ostatnich latach ze względu na potencjalne zastosowania.

Rozdział 3.

Rozdział ten wiąże się z opublikowaną wspólnie z prof. R. Szczeniakiem i dr A. P. Durajskim pracą doktoranta w czasopiśmie *Physica Scripta*, która została wyróżniona w ramach procedury IOPselect i w której opisano właściwości nadprzewodzące związku SrPt_3P przy pomocy równań Eliashberga. Autorzy publikacji otrzymali zaskakującą zgodność wartości przerwy energetycznej na powierzchni Fermiego oraz stosunku R_Δ i R_c z danymi eksperymentalnymi w porównaniu z wynikami teorii BCS. Wiadomo, że jednym z wyników teorii BCS jest uniwersalność różnych własności termodynamicznych (zob. np. wzór 1.24 w rozprawie) i tym samym nierozróżnialność od strony opisu w ramach tej teorii. Jednocześnie obserwuje się odchylenia od własności uniwersalności w ramach teorii BCS dla niektórych nadprzewodników. Z kolei opis stanu nadprzewodzącego przy pomocy równań Eliashberga ściśle związany jest z wynikami eksperymentalnymi i wręcz zadziwiająco z nimi zgodny w przypadku niektórych współczynników termodynamicznych. Dlatego ciekawy jestem odpowiedzi doktoranta na następujące pytanie:

Q1: Na ile opis nadprzewodzących antyperowskitów poprzez równania Eliashberga przy tak dużej zgodności z eksperymentem pozwalałby na stwierdzenie, że badany nadprzewodnik jest nadprzewodnikiem Eliashberga? Częściowej odpowiedzi na to pytanie doktorant udzielił w Rozdziale 5. pisząc o konieczności uogólnienia modelu.

W części pierwszej Rozdziału 3 omówione zostały wyniki teoretyczne oraz eksperymentalne właściwości nadprzewodnictwa w związkach APt_3P , gdzie $A=\text{Sr}, \text{Ca}, \text{La}$. Na str 37 doktorant napisał, że we wszystkich trzech badanych związkach stwierdzono występowanie oddziaływania spin-orbita, o mniejszym wkładzie.

Q2: Oczekiwałbym poszerzenia tego fragmentu dodatkowymi informacjami nt roli sprzężenia spin-orbita dla stanu nadprzewodzącego.

Rozdział 4.

Rozdział jest bardzo ważny dla pełniejszego zrozumienia mechanizmu pojawiania się własności nadprzewodzących w antyperowskitach na bazie niklu, w którym to przypadku duża koncentracja atomów niklu sugerowałaby raczej brak własności nadprzewodzących. Wyniki rozdziału oparte są na publikowanych pracach grupy prof. R. Szczeniaka, w tym pracy wspólnej z doktorantem. W tym rozdziale porównane zostały własności termodynamiczne antyperowskitów MgCNi_3 oraz CdCNi_3 .

Wyniki otrzymane przy pomocy równań Eliashberga sugerują, że związek MgCNi_3 znacznie odbiega od przewidywań teorii BCS niż związek CdCNi_3 .

Rozdział 5.

Rozdział ten jest bardzo ciekawym fragmentem rozprawy doktorskiej sugerującym kierunek uogólnienia formalizmu Eliashberga a którego propozycją całkowicie zgadzam się. Doktorant nazwał go skromnie jako kierunek budowy oprogramowania.

Rozdział 6.

Rozdział jest bardzo specjalistyczny i dotyczy omówienia budowy podstawowego pakietu oprogramowania do badania właściwości nadprzewodzących, który w rozprawie nazwany jest rdzeniem wielopakietowym oprogramowania PostEliash. Przeczytałem go z dużym zainteresowaniem. Niewątpliwie zbudowanie pełnej wersji tego oprogramowania wraz z użyciem metod ab initio stałoby się pewnym standardem do analiz stanu nadprzewodzącego materiałów.

Podsumowując, uważam, że przedstawiona do oceny rozprawa doktorska spełnia ustawowe warunki stawiane przed rozprawami doktorskimi. Praca oparta jest na publikacjach doktoranta, które są bardzo ważne ze względu na otrzymane wyniki analiz własności nadprzewodzących antyperowskitów. Prace są cytowane.

Proszę o dopuszczenie rozprawy doktorskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Jednocześnie wnioskuję o nagrodę dla tej rozprawy jako rozprawy wyróżniającej. Jako uzasadnienie chciałbym podkreślić, że otrzymane wyniki dotyczą materiałów dla których mechanizmy prowadzące do pojawiania się stanu nadprzewodzącego są dopiero poznawane. Tym samym wyniki ilościowe w ramach modelu teoretycznego, który został przedstawiony w tej pracy, zyskują dodatkową wartość mogąc być porównywane z wynikami eksperymentalnymi.

Mirosław Duda