

*Dr hab. Ryszard J. Wojciechowski, prof. UAM*

*Poznań, dnia 30.07.2017r.*

*Wydział Fizyki*

*Uniwersytet im. Adama Mickiewicza*

*w Poznaniu*

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr inż. Doroty Grzybowskiej zatytułowanej  
„Nadprzewodnictwo w układach ze złamaną symetrią inwersji”**

Rozprawa doktorska mgr inż. Doroty Grzybowskiej została wykonana na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej, pod kierunkiem dr. hab. inż. Grzegorza Harania .

Tematyka rozprawy dotyczy własności fazy nadprzewodzącej w kryształach nie posiadających środka inwersji przestrzennej. Prototypem układu o złamanej symetrii inwersji przestrzennej jest kryształ  $\text{CePt}_3\text{Si}$ , którego własności nadprzewodzące zostały odkryte przez Bauera i współpracowników w 2004r. (praca [16] w spisie literatury)  $\text{CePt}_3\text{Si}$  wykazuje uprządkowanie antyferromagnetyczne w  $T_N \approx 2.2$  K i przechodzi w stan nadprzewodzący w temperaturze  $T_c \approx 0.75$  K. Jest to pierwszy nadprzewodnik ciężkofermionowy o złamanej symetrii inwersyjnej. Mechanizm parowania w tym kryształcie nie jest dotychczas całkowicie wyjaśniony, ale z pewnością kryształ ten należy do klasy nadprzewodników o niekonwencjonalnym mechanizmie parowania, w których dużą rolę odgrywają fluktuacje spinowe.

Celem rozprawy doktorskiej mgr inż. Doroty Grzybowskiej było zbadanie własności parowania singletowego typu „s” i trypletowego typu „p” na sieci

kwadratowej w modelu ciasnego wiązania. W pracy gruntownie zbadano rolę antysymetrycznego sprzężenia spin-orbita, które pojawia się w układach o złamanej symetrii inwersji przestrzennej. Zbadano także rolę oddziaływania zeemanowskiego dla pola magnetycznego przyłożonego prostopadle do sieci kwadratowej.

Badanie symetrii stanu nadprzewodzącego należy do najważniejszych zagadnień związanych z nadprzewodnictwem, ponieważ dostarcza ona informacji o możliwych mechanizmach stabilizujących nadprzewodnictwo. Analiza symetrii nadprzewodzącego parametru porządku zajmuje znaczną część rozprawy doktorskiej, i niewątpliwie należy to zaliczyć do jej walorów.

Przyjęty w rozprawie model i zastosowane przybliżenia pozwoliły uwzględnić efekty wynikające z szerokości pasma jak też z osobliwości van Hove'a. Dotychczas wpływ wyżej wspomnianych efektów na własności nadprzewodzące nie był intensywnie badany lub nawet całkowicie pomijany np. w pracy Frigeri'ego (praca [39] w spisie literatury) czy też w pracy Barzykina (praca [42] w spisie literatury), bazujących na przybliżeniu gazu fermionowego. Fakt ten był z pewnością motywacją doktorantki do podjęcia własnych badań nad tym zagadnieniem w ramach rozprawy doktorskiej. Interesującym i ważnym aspektem tych badań jest problem stabilności stanu nadprzewodzącego w układach ze złamaną symetrią inwersyjną.

Rozprawa doktorska obejmuje łącznie 147 stron i składa się ze streszczenia, 7 rozdziałów, 2 dodatków zawierających szczegóły rachunkowe i wyprowadzanie niektórych wzorów, spisu literatury (100 pozycji), wykazu użytych skrótów i oznaczeń oraz krótkiego rozdziału prezentującego sylwetkę doktorantki, wraz z listą jej publikacji, obejmującą 4 pozycje. Dwie z nich (poz. 3 i 4) zawierają sporą część wyników badań uzyskanych w ramach rozprawy doktorskiej. Rozdział ten

zawiera także listę konferencji, w których doktorantka uczestniczyła. Najciekawsze rozdziały, zawierające główne i oryginalne wyniki autorki, to rozdziały od czwartego do szóstego. Wszystkie wyniki zostały zebrane i bardzo szczegółowo omówione w rozdziale siódmym.

Zanim przejdę do oceny rozprawy, przedstawię pokrótce jej zawartość.

W rozdziale pierwszym omówiono podstawowe własności nadprzewodników nieposiadających środka inwersji, co umożliwia występowanie antysymetrycznego sprzężenia spin-orbita i w konsekwencji prowadzi do wielu niezwykłych efektów, takich jak np. rozszczepienie powierzchni Fermiego, występowanie mieszanego singletowo-trypletowego stanu nadprzewodzącego czy też parowania wewnątrz- i między-pasmowego. Efekty te są głównym przedmiotem badań niniejszej rozprawy doktorskiej. Podstawowe znaczenie w tych badaniach odgrywa symetria parowania, która również omówiona jest w tym rozdziale. W dalszej części podany jest podstawowy model stosowany w rozprawie. Składa się on z następujących członów:

1. Hamiltonian opisujący strukturę pasmową, z uwzględnieniem istotnej roli, jaką odgrywa oddziaływanie spin-orbita typu Rashby, wynikające z braku symetrii inwersyjnej. W obliczeniach zakłada się dwuwymiarową sieć kwadratową i przybliżenie ciasnego wiązania;
2. Wyraz typu Zeemana opisujący paramagnetyczne oddziaływanie z zewnętrznym polem magnetycznym;
3. Efektywny potencjał parujący w bardzo ogólnej postaci, która umożliwia analizę różnych symetrii parowania oraz parowania wewnątrz-pasmowego i międzypasmowego.

Rozdział drugi jest poświęcony formalizmowi temperaturowych funkcji Greena zaadoptowanemu do układów ze złamaną symetrią inwersji przestrzennej, w obecności zewnętrznego pola magnetycznego. Stosując przybliżenie pola

średniego dla modelowego hamiltonianu otrzymano układ algebraicznych równań Gorkova, które następnie użyte zostały w obliczeniach numerycznych, osobno dla parowania singletowego, oraz w postaci zlinearyzowanej również dla parowania trypletowego. Otrzymane podstawowe równania i relacje są wykorzystywane w następnych rozdziałach do analizy stanu nadprzewodzącego. Z dyskusji anomalnej funkcji Greena wynika możliwość egzotycznego parowania dla nieparzystych częstości.

Rozdział trzeci jest w całości poświęcony gęstości stanów hamiltonianu pasmowego układu o złamanej inwersji przestrzennej dla sieci kwadratowej. Po przeprowadzeniu transformacji diagonalizującej, opisanej szczegółowo w dodatku A, zdefiniowana jest gęstość stanów dla poszczególnych pasm Rashby (stanów helikalnych). Obliczenie gęstości stanów wymaga całkowania po dwóch zmiennych z uwzględnieniem osobliwości van Hove'a i jest dość kłopotliwe w przypadku występowania antysymetrycznego sprzężenia spin-orbita. W dodatku B Autorka pokazała jak można analitycznie zredukować ilość całkowań z dwóch do jednego w przypadku gęstości stanów hamiltonianu jednocząstkowego oraz dla splotu lokalnej gęstości stanów. Przeprowadzona gruntowna analiza numeryczna gęstości stanów w szerokim zakresie wartości sprzężenia spin-orbita dla różnych wartości wypełnienia pasma jest wykorzystana w dalszej części rozprawy, między innymi, do dyskusji wpływu sprzężenia spin-orbita na temperaturę krytyczną w przypadku parowania wewnątrzpasemowego.

Najważniejsze rozdziały, bo zawierające własne wyniki Autorki, to rozdziały od czwartego do szóstego. W rozdziale czwartym Autorka skoncentrowała się na analizie własności nadprzewodzących nadprzewodników singletowych typu „s” w szerokim zakresie wartości potencjału parującego i wypełnień pasma. Ciekawym i oryginalnym wynikiem jest pokazanie, że antysymetryczne sprzężenie spin-orbita wpływa znacząco na temperaturę krytyczną

poprzez gęstość stanów. Rozdział piąty jest kontynuacją i rozszerzeniem rozdziału czwartego. W rozdziale tym Autorka zajmuje się uprządkowaniami trypletowymi typu „p”, które wynikają z założonej symetrii sieci, w obecności tzw. separowalnego potencjału parującego. Zostały pokazane mechanizmy decydujące o własnościach nadprzewodzących różnych stanów trypletowych.

W rozdziale szóstym Autorka zajmuje się wpływem zewnętrznego pola magnetycznego na własności nadprzewodnika singletowego typu „s”. Autorka szczegółowo przeanalizowała przypadek pola prostopadłego do dwuwymiarowej sieci i po raz pierwszy pokazała, że możliwe jest nieciągłe przejście pomiędzy dwiema fazami, różniącymi się wartością parametru porządku. Sporo miejsca w tym rozdziale zajmuje badanie wpływu antysymetrycznego sprzężenia spin-orbita na stan nadprzewodzący w obecności zewnętrznego pola magnetycznego. Otrzymane przez autorkę diagramy fazowe i przeprowadzona przez nią analiza świadczy o dużej wiedzy autorki.

W rozdziale siódmym Autorka podsumowała swoją rozprawę i zawarła w nim wszystkie otrzymane przez nią wyniki.

Użyte w rozprawie metody analityczne i numeryczne, służące rozwiązaniu konkretnych problemów fizycznych, pozwalają wyciągnąć szereg interesujących wniosków dotyczących stanu nadprzewodzącego układów z złamaną symetrią inwersji przestrzennej. Wyniki badań mgr inż. Doroty Grzybowskiej prezentowane w rozprawie w rozdziale czwartym i piątym, zostały już opublikowane (2 publikacje). Wyniki zawarte w rozdziale szóstym, dotyczące efektów zewnętrznego pola magnetycznego, są bardzo interesujące. Szkoda, że Autorka ich jeszcze nie opublikowała.

Rozprawa doktorska zawiera wiele interesujących i oryginalnych rezultatów zebranych i omówionych szczegółowo w rozdziale siódmym. Ograniczę się tutaj do wymienienia niektórych, moim zdaniem najciekawszych:

- W odróżnieniu od wyników innych autorów w pracy pokazano, że w przypadku parowania singletowego typu „s” i stanu trypletowego  $A_2$ , duży wpływ na temperaturę krytyczną ma antysymetryczne sprzężenie spin-orbita oraz zapełnienie pasma.
- Pokazano, że asymptotyczny zanik temperatury krytycznej dla parowania wewnątrzpasmowego dla dużych wartości antysymetrycznego sprzężenia spin-orbita jest konsekwencją poszerzenia pasma. Wzrost temperatury krytycznej dla parowania wewnątrzpasmowego spowodowany jest przez osobliwości van Hove’a dla niektórych stanów trypletowych.
- Zbadano możliwości wystąpienia nieciągłych przejść fazowych, a w szczególności pokazanie, że przejścia te zanikają w miarę wzrostu antysymetrycznego sprzężenia spin-orbita.
- Zbadano wpływ antysymetrycznego sprzężenia spin-orbita na indukowane przez pole magnetyczne parowanie trypletowe dla nieparzystych częstotliwości.

Ogólną konkluzję wynikającą z recenzowanej pracy można, moim zdaniem, sprowadzić do stwierdzenia, że dla wprowadzonego modelu, opisującego układy ze złamaną symetrią inwersji przestrzennej, istotny wpływ na własności nadprzewodzące tych układów mają: antysymetryczne sprzężenie spin-orbita, zapełnienie pasma, osobliwości van Hove’a, zewnętrzne pole magnetyczne oraz amplitudy potencjału parującego.

Mam też kilka uwag i pytań do Autorki.

1. Brakuje komentarza lub uzasadnienia dlaczego w rozprawie rozpatruje się sieć dwuwymiarową. Wiadomo, że przywoływany przez Autorkę kryształ  $\text{CePt}_3\text{Si}$  ma symetrię tetragonalną typu  $\text{AuCu}_3$ .
2. Co oznacza nieunitarny parametr porządku i czy można rozróżnić eksperymentalnie nadprzewodniki o unitarnym i nieunitarnym parametrze porządku?
3. Na stronie 35 Autorka pisze: „Dlatego prawdopodobnie nasze problemy z energiami kwazicząstek w polach innych niż prostopadłe związane są z poczynionym na wstępie tego podrozdziału założeniem istnienia uporządkowania typu „s””. Oczywiście ograniczenie dalszych obliczeń do pól prostopadłych jest wyborem autorki i tu nie mam zastrzeżeń, ale sugestia, że ma to związek z symetrią parowania typu „s” wymaga bardziej szczegółowego wyjaśnienia.
4. Co na podstawie aktualnych badań można powiedzieć o mechanizmie parowania w  $\text{CePt}_3\text{Si}$ ?

Uwag krytycznych mam niewiele i dotyczą one przede wszystkim strony redakcyjnej. Oto niektóre z nich:

- ❖ Nie ma odwołań do prac numer [77] i [84]. Odwołanie do pracy [76] jest dopiero na str. 110, a powinno być na str.28.
- ❖ Na str. 45 rozprawy jest odwołanie do nieistniejącego dodatku C. Powinno to być dodatek B.
- ❖ Brakuje PPG (str.28) w wykazie skrótów.

Metody badawcze stosowane w pracy doktorskiej mgr inż. Doroty Grzybowskiej są moim zdaniem adekwatne do postawionego zadania, a otrzymane przez nią wyniki są przekonujące. Warto w tym miejscu podkreślić, że wyniki

swoich badań doktorantka skonfrontowała z wieloma wynikami badań innych autorów. Mgr inż. Dorota Grzybowska posiada praktyczne umiejętności w posługiwaniu się zaawansowanymi technikami teoretycznymi, które zastosowała z powodzeniem w swojej rozprawie doktorskiej.

W podsumowaniu stwierdzam, że przedstawiona mi do recenzji rozprawa doktorska pani mgr inż. Doroty Grzybowskiej spełnia w zupełności wymogi zawarte w Ustawie o Tytule i Stopniach naukowych, i wobec tego wnoszę o dopuszczenie pani Doroty Grzybowskiej do publicznej obrony.

A handwritten signature in blue ink, reading "Zygoraj Wojciechowski". The signature is written in a cursive, flowing style.