



Ocena rozprawy habilitacyjnej dra Artura Piotra Durajskiego p.t.

"Wysokotemperaturowy stan nadprzewodzący w układach o konwencjonalnym oraz niekonwencjonalnym mechanizmie parowania"

i Jego dorobku naukowego.

Dr Artur Piotr Durajski ukończył studia magisterskie z fizyki technicznej na Wydziale Inżynierii Procesowej, Materiałowej i Fizyki Technicznej w Politechnice Częstochowskiej w 2011r.

W latach 2011-2014 odbył studia doktoranckie na Politechnice Częstochowskiej. Stopień naukowy doktora nauk fizycznych uzyskał na Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu Zielonogórskiego w 2014 r. na podstawie rozprawy p.t. „Właściwości termodynamiczne wysokociśnieniowego stanu nadprzewodzącego w związkach wodorowanych”. Promotorem był dr hab. Radosław Szczęśniak z Politechniki Częstochowskiej. Rozprawa została wyróżniona przez Radę Wydziału Fizyki i Astronomii Uniwersytetu Zielonogórskiego. Obecnie, dr A. Durajski pracuje na stanowisku adiunkta w Instytucie Fizyki Politechniki Częstochowskiej, w którym od roku 2016 pełni funkcję kierownika Zakładu Fizyki Ciała Stałego. W 2015 r. Habilitant odbył 3-miesięczny staż naukowy w grupie prof. L. Pletronero, Department of Physics, University of Rome La Sapienza, a także krótkoterminowe staże badawcze w The Institute of Complex Systems, National Research Council (Włochy), w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Zielonogórskiego -2014r. oraz 1- miesiąc w School of Physics and Electronic Engineering, Jiangsu Normal University (Chiny) w 2018 r.

Specjalizacją naukową dra A. Durajskiego jest fizyka teoretyczna ciała stałego, a przede wszystkim teoria nadprzewodnictwa. Całkowity dorobek naukowy dra A. Durajskiego obejmuje 65 prac opublikowanych w czasopismach międzynarodowych znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (JRC), 4 prace poza bazą JRC oraz 2 opracowania zbiorowe w Materiałach Politechniki Częstochowskiej. Po doktoracie opublikował 44 prace w większości w dobrych lub bardzo dobrych czasopismach międzynarodowych, a wyniki badań przedstawiał na wielu konferencjach międzynarodowych w kraju i za granicą, m.in. osobiście uczestniczył w 19 konferencjach przedstawiając referaty ustne i plakaty. Swoje prace opublikował m.in. w prestiżowym Scientific Reports (Nature Publishing Group)-3; Physical Review B-2; Annalen der Physik-2, Journal of Chemical Physics-1; Chaos-1; Europhysics Letters-1; Superconductor Science and Technology-5; Physica C-5; Frontiers of Physics-3; Solid State Communications-10; Journal of Superconductivity and Novel Magnetism-5; Journal of Physics and Chemistry of

Solids-3; Acta Physica Polonica -4; Physica Status Solidi b -2; Physica B-3; European Physical Journal B -2; Physica Scripta-2 , Journal of Low Temperature Physics-2; Solid State Sciences-3; oraz w innych międzynarodowych periodykach naukowych.

W sumie dr A.P. Durajski jest bardzo aktywnym młodym naukowcem z bardzo dużym już i poważnym dorobkiem naukowym.

Jako dysertację habilitacyjną dr A. Durajski przedstawia cykl 10 publikacji powiązanych tematycznie [A1-A10] zatytułowany: "Wysokotemperaturowy stan nadprzewodzący w układach o konwencjonalnym oraz niekonwencjonalnym mechanizmie parowania" oraz 42 stronicowy Autoreferat w języku polskim przedstawiający opis osiągnięć naukowych i dorobku. Prace opublikowano w bardzo dobrych czasopismach: Physica C ([A1], [A6]), Annalen der Physik ([A2], [A10]), Scientific Reports (Nature Publishing Group)([A3], [A4], [A5]) ,Journal of Chemical Physics ([A7]), Superconductor Science and Technology ([A8]) i Frontiers of Physics ([A9]).

Prace [A3] i [A9] są samodzielne pozostałe osiem to prace współautorskie. Głównym współautorem jest dr hab. R. Szczęśniak. Załączono oświadczenia wszystkich współautorów, jak również oświadczenia Habilitanta określające wkład w powstanie prac zbiorowych.

Tematyka rozprawy habilitacyjnej obejmuje układy nadprzewodzące o wysokiej temperaturze krytycznej, zarówno ostatnio odkryte związki wodorowane pod wysokim ciśnieniem (rodzina H₂S i H₃S) jak i nadprzewodniki miedziowo-tlenowe. Oczywiście są to wiodące zagadnienia fizyki fazy skondensowanej.

W pracach [A1-A7], do analizy nadprzewodnictwa związków wodorowanych, zastosowano konwencjonalną teorię Eliashberga-Migdala (EM) dla nadprzewodników z fononowym mechanizmem sprzężenia, w połączeniu z obliczeniami typu ab initio opartymi na teorii funkcjonału gęstości. Zaproponowano zaawansowane numeryczne rozwiązania dla parametrów stanu nadprzewodzącego. Równania Eliashberga rozwiązywano na osi urojonej oraz w reprezentacji mieszanej.

W pracy [A1] (Physica C-2005) badano związek H₂S pod wysokim ciśnieniem od 130 do 150 GPa. Zastosowano formalizm Eliashberga w reprezentacji mieszanej (sformułowanie na osi urojonych i rzeczywistych częstości) podanej przez Marsiglio, Schossmana i Carbotte (Phys. Rev. B37, 4965 (1988)). Konwencjonalny schemat EM i założenie typowej wartości pseudopotencjału kulombowskiego 0.15 reprodukuje trend eksperymentalny dla wzrostu T_c od 31K do 88K z rosnącym ciśnieniem. Numerycznie wyznaczono parametr porządku w stanie podstawowym ($\Delta(0)$), skok ciepła właściwego w T_c i termodynamiczne pole krytyczne H_c(0). Obliczone stosunki bezwymiarowe: $R_{\Delta}=2\Delta(0)/k_B T_c$, dla skoku ciepła właściwego (R_c) i w kombinacji z termodynamicznym polem krytycznym (R_H) odchylają się od wartości uniwersalnych teorii BCS (3.52,1.43,2.21), generalnie rosną one ze wzrostem ciśnienia. Autorzy szacują

maksymalną temperaturę krytyczną dla całej rodziny H_nS ($n \geq 2$) na 290K, i stosunki bezwymiarowe na 6.53, 3.99, 0.093.

W pracy [A2] (Annalen der Physik 2016) zbadano dwa związki wodorowane: H_3S oraz D_3S pod ciśnieniem. Jak wiadomo, dla H_3S grupa Drozdova i Eremetsa w 2014r. odkryła eksperymentalnie nadprzewodnictwo z $T_c=203K$ pod ciśnieniem 150 GPa. Równania teorii Eliashberga w reprezentacji mieszanej rozwiązywano numerycznie, w oparciu o funkcję Eliashberga $\alpha^2F(\omega)$, podaną wcześniej przez grupę japońską i wyznaczoną w obliczeniach typu ab initio (R. Akashi et al., Phys. Rev. B91,224513 (2015)). Dla ciśnienia 150 GPa odtworzono eksperymentalne wartości $T_c=203K$ dla H_3S i $T_c=147K$ dla D_3S .

W pracy [A2] zaanalizowano odpowiednie charakterystyki stanu nadprzewodzącego oraz zmiany współczynnika izotopowego wraz z ciśnieniem. Potwierdzono, że efekty retardacji i silnego sprzężenia, które teoria EM uwzględnia, powodują odchylenia od przewidywań modelu BCS w tej grupie materiałów wodorowanych.

W samodzielnej publikacji [A3] (Scientific Reports-2016), dr Durajski zbadał wpływ poprawek nieadiabacyjnych w nadprzewodnikach H_3S i PH_3 pod ciśnieniem. W tym celu przeprowadził obliczenia numeryczne uogólnionych równań Eliashberga, które uwzględniają poprawki wierzchołkowe najniższego rzędu. Do wyznaczenia funkcji Eliashberga $\alpha^2F(\omega)$, spektrum fononów i elektronowej gęstości stanów użyto obliczeń typu ab initio, stosując ogólnodostępny pakiet oparty na teorii funkcjonału gęstości - Quantum-Espresso. Przeprowadzona analiza pokazała, że wpływ poprawek nieadiabacyjnych w badanych materiałach nie jest kluczowy. Ustalając eksperymentalne wartości T_c , dr Durajski otrzymał, że poprawki wierzchołkowe redukują wartości pseudopotencjału kulombowskiego, natomiast odpowiednie wielkości jak szczelina energetyczna, efektywna masa elektronu i stosunek szczelinowy R_Δ nie są modyfikowane. Uzasadnia to stosowalność konwencjonalnej teorii EM do opisu wysokotemperaturowego nadprzewodnictwa w grupie materiałów wodorowanych pod wysokim ciśnieniem.

W pracy [A4] (Scientific Reports-2017), Durajski i Szczęśniak przedstawili studium z pierwszych zasad własności elektronowych i nadprzewodnictwa w H_3S pod ekstremalnie wysokim ciśnieniem hydrostatycznym aż do 500 GPa. Praca ta metodycznie jest rozwinięciem pracy [A2]. Pokazano, że H_3S wykazuje nadprzewodnictwo w zakresie bardzo wysokich ciśnień (250 - 500 GPa), jednakże obliczona temperatura krytyczna z teorii Eliashberga nie przewyższa 203K. (Fig.6 w [A4]).

Z kolei w pracy [A5] (Scientific Reports-2018), Szczęśniak i Durajski znaleźli niezwykle efekt izotopowy w H_3S . Zbadali podstawienia ^{32}S cięższymi izotopami ^{33}S , ^{34}S i ^{36}S i ich wpływ na własności elektronowe, dynamikę sieci i temperaturę krytyczną H_3S . Zastosowano metodologię z prac [A2] i [A3]. Stwierdzono wzrost T_c o 20% dla H_3S z 202K do 242K pod ciśnieniem 155 GPa, po podstawieniu izotopowym (Figs.6-7 w [A5]). Ponadto, zaobserwowano silny ujemny efekt

izotopowy(-1.5) pomiędzy $H_3^{33}S$ i $H_3^{36}S$. Te interesujące wyniki dla efektu izotopowego mogą być testowane w eksperymentach wysokociśnieniowych.

Praca [A6] (Physica C-2018) przedstawia podobną analizę nadprzewodnictwa dla H_3S domieszkowanym fosforem, układu $H_3S_{1-x}P_x$. W szczególności stwierdzono, że częściowe podstawienie atomów siarki atomami sąsiadującego w układzie okresowym fosforu, powoduje obniżenie temperatury krytycznej w całym zakresie rozpatrywanych ciśnień (Fig.5 w [A6]). Wyniki uzyskano metoda superkomórek i porównano z obliczeniami opartymi na metodzie przybliżenia kryształu wirtualnego.

Praca [A7] (Journal of Chemical Physics-2018) przedstawia podobne obszerne studium własności elektronowych, wibracyjnych i nadprzewodzących H_3Cl pod wysokim ciśnieniem. Zastosowano obliczenia typu ab initio oparte na teorii funkcjonału gęstości i teorię EM.

W zakresie ciśnień 150-250 GPa, otrzymano duże wartości sprzężenia elektron-fonon ($\lambda=2.21$) i w ramach teorii EM otrzymano wysokie wartości $T_c=198K$ w 150 GPa, porównywalne z tymi dla H_3S . Dalszy wzrost ciśnienia skutkuje obniżeniem wartości λ do 0.91 dla $p=250$ GPa. Jednakże okazało się, że wprowadzenie bardziej elektroujemnego pierwiastka Cl w miejsce siarki nie jest czynnikiem powodującym oczekiwany wzrost T_c .

Sumując, w pracach [A1-A7] dr A. Durajski przedstawił bardzo ciekawą i wyczerpującą analizę stanu nadprzewodzącego w materiałach wodorowanych pod wysokim ciśnieniem. Przytoczone rezultaty wymagają weryfikacji eksperymentalnej poprzez pomiary parametrów stanu nadprzewodzącego i T_c odpowiednio zsyntetyzowanych próbek. Zastosowane metody są znane w literaturze, natomiast złożone obliczenia numeryczne wykonane z użyciem metod typu ab initio w połączenie z konwencjonalną teorią Eliashberga nadprzewodników z silnym sprzężeniem elektron-fonon, niewątpliwie doprowadziły do znacząco lepszego zrozumienia nowych materiałów o ekstremalnie wysokich T_c pod wysokim ciśnieniem.

Rezultaty tych prac zostały wyraźnie dostrzeżone w literaturze, m.in. praca [A1] jest cytowana w niedawnym przeglądzie V. Kresin and L. P. Gorkov, „High pressure and road to room temperature superconductivity”, Reviews of Modern Physics 90, 011001 (2018); praca [A2] została wyróżniona przez Edytora Annalen der Physik (Editor's Choice) i umieszczona na okładce majowego wydania w 2016r. oraz uznana za jedną z najciekawszych prac opublikowanych w Annalen der Physik w tymże roku.

Grupa prac [A8-A10] skupia się na nadprzewodnikach miedziowo-tlenowych. Jak wiadomo konwencjonalna teoria EM z klasycznym sprzężeniem elektron-fonon nie wyjaśnia wysokotemperaturowego nadprzewodnictwa w miedzianach, z kilku powodów. W tych pracach dr. A. Durajski zbadał model nadprzewodnictwa w miedzianach z niekonwencjonalnym mechanizmem fononowym zaproponowany wcześniej przez dr hab. R. Szcześniaka w 2012 r. Model opiera się na rozszerzeniu hamiltonianu Fröhlicha o dodatkowy wyraz opisujący oddziaływanie elektron-elektron-fonon. Dalsze założenia to dwuwymiarowa struktura krystaliczna,

następnie istnienie pewnego, niekoniecznie silnego oddziaływania elektron-bozon (fonon)–mechanizm Fröhlicha, oraz korelacje elektronowe, które są związane z emisją lub absorpcją fononu. Prowadzi to do teorii z oddziaływaniem dwójkowym między elektronami i fononami (Hamiltonian (1-4) w pracy [A8]).

Zastosowanie transformacji kanonicznej eliminującej fononowe stopnie swobody prowadzi do efektywnego Hamiltonianu elektronowego z tradycyjnym oddziaływaniem przyciągającym jak i do sprzężenia czwórkowego (Hamiltonian (5-8), w pracy [A8]). Dalsze uproszczenia wprowadzają dwa parametry przyciągające V oraz U , charakteryzujące odpowiednio sprzężenie dwójkowe i czwórkowe. Hamiltonian efektywny rozwiązano metodą pola średniego. Raczej modelowo zaproponowano Hamiltonian (15-17) z potencjałami parowania dla narzuconej symetrii typu d-wave. Rozwiązania ilustrowano graficznie. Autorzy wyznaczają parametry V i U z eksperymentalnych wartości T_c oraz temperatury Nernsta (pseudoszczeliny). Nie jest to procedura oczywista ani też dobrze uzasadniona. Niemniej jednak uzyskane porównania z eksperymentem ARPES dla YBaCuO w $T=10K$ są rozsądne. W samodzielnej pracy [A9], dr. A. Durajski zbadał strukturę anizotropowego parametru porządku Δ_k (symetria d-wave) i ewolucję szczeliny energetycznej dla nadprzewodnika Bi2212 w funkcji temperatury i domieszkowania dziuowego, rozszerzając analizę z pracy [A8]. Wyniki te korelują z eksperymentami ARPES. Nadmienmy jednak, że w rozwiązaniu pola średniego i dla symetrii s, stwierdzono wcześniej, że model prowadzi do przejścia nadprzewodzącego 1-go rodzaju. Ponadto analiza teoretyczna ignoruje obecność potencjału chemicznego, który w zasadzie powinien kontrolować stopień domieszkowania. Część z tych obiekcji usunięto w pracy [A10], w której sformułowano równania typu Eliashberga dla omawianego modelu z oddziaływaniami elektron-fonon, elektron-elektron-fonon i uwzględniono potencjał chemiczny. Rozwiązania numeryczne otrzymano dla symetrii s-wave i sieci kwadratowej z przeskokiem do najbliższych sąsiadów. Otrzymano przejście fazowe 2-go rodzaju i w przypadku wysokiej wartości potencjału oddziaływania elektron-elektron-fonon, zależności parametru porządku w funkcji domieszkowania są podobne do tych obserwowanych eksperymentalnie w miedzianach. Temperaturowa ewolucja elektronowej gęstości stanów wykazuje pseudoszczelinę powyżej T_c , co stanowi faktycznie bardzo interesujący rezultat. Jak Habilitant przyznaje, dalsze rozwinięcie modelu musi uwzględniać efekty silnych korelacji elektronowych w miedzianach.

W podsumowaniu rozprawa habilitacyjna dra A. Durajskiego zawiera szereg oryginalnych, i wartościowych rezultatów, szczególnie dla nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego w związkach wodorowanych pod wysokim ciśnieniem. Wyniki w niej zawarte, w mojej opinii dają bardzo dobry i ciekawy wkład do fizyki nadprzewodników wysokotemperaturowych, a przedstawiona rozprawa spełnia w zupełności wymogi pracy habilitacyjnej.

Pozostały dorobek Habilitanta jest znaczny i różnorodny. Dr A. Durajski współpracuje naukowo z dr hab. R. Szczeniakiem od studiów magisterskich-2009 r. Opublikowali oni szereg wspólnych prac z teorii nadprzewodnictwa, głównie opartych na mechanizmie sprzężenia elektron-fonon. Ponadto, wśród rezultatów współautorskich prac, nie wchodzących w skład rozprawy, na wyróżnienie zasługują, osiągnięcia w następujących tematach:

- I) Przejście półprzewodnik-metal, właściwości elektronowe i nadprzewodnictwo dwuwymiarowych układów dichalkogenidków metali przejściowych, jak MoS_2 , WS_2 , MoSe_2 , współpraca z R. Szczeniakiem i M. Jarosikiem prace [102-104] w Bibliografii Autoreferatu.
- II) Oscylacje kwantowe w warstwach nadprzewodzącego ołowiu oraz badania nad układami typu grafenowego (prace [105-109]).
- III) Zainteresowania dra Durajskiego obejmują też zjawiska transportu elektronowego w układach o niestandardowej geometrii - praca [100] w Europhysics Letters wspólnie z A. Khaterem i R. Szczeniakiem.
- IV) Wspólnie z prof. W. Leońskim z Uniwersytetu Zielonogórskiego, dr Durajski badał zjawisko chaosu w układach molekularnych (praca [102], M.W, Jarosik et al., Chaos 28, 012126 (2018)).

Dr A. Durajski jest dojrzałym, samodzielnym badaczem, a Jego dorobek naukowy jest bogaty i wartościowy. Jego prace są cytowane w literaturze, całkowita liczba cytowań wynosi 569 (336 bez autocytowań, około 60 %), a tzw. indeks Hirscha $h=16$. Jest fizykiem o szerokich zainteresowaniach badawczych. Dr Durajski bierzy aktywny udział w grantach krajowych MNiSW i NCN. W latach 2012-2017 był kierownikiem 6 grantów wydziałowych, finansowanych ze środków Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego. Od 2017 r. jest kierownikiem projektu „Struktura krystaliczna oraz właściwości termodynamiczne nowych nadprzewodników wysokotemperaturowych” przyznanego w konkursie SONATA12 Narodowego Centrum Nauki.

Dr A. Durajski prowadzi owocną (wspólne publikacje) współpracę naukową z ośrodkami krajowymi i zagranicznymi.

Za działalność naukową był wielokrotnie nagradzany, Otrzymał stypendium dla młodych uczonych START 2017 Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej, stypendium dla wybitnych młodych naukowców MNiSW w 2018r., nagrody Polskiego Towarzystwa Fizycznego za pracę magisterską i doktorską oraz dwa stypendia dla Młodych Fizyków uczestników Zjazdów Fizyków Polskich, oraz szereg Nagród Naukowych Rektora Politechniki Częstochowskiej. Jest on także aktywnym dydaktykiem i popularyzatorem fizyki. Był promotorem pomocniczym w dwóch zakończonych przewodach doktorskich, aktualnie jest promotorem pracy doktorskiej mgra Kamila Skoczylasa, prowadził wiele prac magisterskich. Recenzował szereg prac nadsyłanych do (24) czasopism międzynarodowych.

Biorąc pod uwagę całokształt bogatego i bardzo wartościowego dorobku naukowego a w szczególności rozprawę habilitacyjną, uważam że kwalifikują one w zupełności doktora Artura P. Durajskiego, do stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Stawiam wniosek o przyjęcie recenzowanej rozprawy jako habilitacyjnej i dopuszczenie dra Artura Piotra Durajskiego do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Poznań, 02.04. 2019 r.

Roman Micnas

prof. dr hab. Roman Micnas