

Kraków, 21 czerwca 2023

**Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr. inż. Kamila Skoczylasa  
pt.: „Analiza struktury elektronowo-fononowej oraz własności termodynamicznych  
wybranych nadprzewodników dwuwymiarowych”**

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska pana mgr. inż. Kamila Skoczylasa pt. „Analiza struktury elektronowo-fononowej oraz własności termodynamicznych wybranych nadprzewodników dwuwymiarowych”, została przygotowana w ramach studiów doktoranckich na Uniwersytecie Humanistyczno-Przyrodniczym im. Jana Długosza w Częstochowie, pod kierunkiem promotora dr hab. Artura Durajskiego, prof. Politechniki Częstochowskiej.

Dysertacja, opracowana w języku polskim, ma charakter teoretyczny i stanowi opracowanie monograficzne autora (zgodnie z Art. 187.3 Ustawy „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce”). Praca liczy łącznie 102 strony i podzielona jest na 7 rozdziałów, poprzedzonych: *Podziękowaniami*, *Dedykacją*, *Dorobkiem naukowym autora*, *Spisem treści*, *Abstraktem* (w języku polskim i angielskim). Ostatnie nienumerowane rozdział to *Spis rysunków* oraz *Bibliografia* (zawierająca 168 pozycji literaturowych). **Właściwa część rozprawy** zawiera rozdziały: *Wprowadzenie*, *Metody obliczeniowe fizyki ciała stałego*, *Stan nadprzewodzący*, *Schemat obranej metody badawczej*, *Właściwości stanu nadprzewodzącego indukującego się w układach na bazie grafenu*, *Właściwości stanu nadprzewodzącego indukującego się w układach warstw fosforenu*, i *Posumowanie wyników badań*.

**Rozdział pierwszy.** Rozdział podzielony jest na trzy sekcje: ogólne wprowadzenie (sekcja bez tytułu), *Motywacja i cel pracy*, i *Układ pracy*. Początek rozdziału (przed sekcją I.1) dotyczy bardzo ogólnego wprowadzenia. W sekcji I.1 autor definiuje swoją motywację i cel pracy – za główny cel pracy, wskazane jest zbadanie wpływu wzbogacenia grafenu (monowarstwy i dwuwarstwy) i fosforenu przez atomy pierwszej i drugiej grupy układu okresowego, na ogólnie rozumiane własności nadprzewodzące. Motywacja i cel wydają się atrakcyjne, nie tylko jako problem naukowy, ale również jako wzywanie numeryczne.

**UNIWERSYTET**  
JANA DŁUGOSZA W CZĘSTOCHOWIE  
RADA DS. NADAWANIA STOPNI NAUKOWYCH  
I STOPNI W ZAKRESIE SZTUKI  
ul. Waszyngtona 4/8, 42-217 Częstochowa

- 1 -

Wpłynęło 14.07.2023



**INSTYTUT  
FIZYKI  
JĄDROWEJ**

im. Henryka  
Niewodniczańskiego

**POLSKIEJ  
AKADEMII  
NAUK**  
w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,  
prof. IFJ PAN  
Zakład Komputerowych  
Badań Materiałów

Autor używa dosyć nietypowego nazewnictwa, np. *wtrącenia* (strona 13) – nie wyjaśnia jednak, czy należy przez to rozumieć *domieszkowanie*, *zanieczyszczenie*, lub wzbogacenie układu o nowe elementy. W kolejnym akapicie pierwsze zdanie dotyczy „wkładu domieszki”. Musze stwierdzić, że mam tutaj problem semantyczny, czy słowo „domieszka” jest tu na miejscu? – szczególnie w kontekście kolejnych rozdziałów.

Sekcja I.2 dotyczy układu pracy oraz omawia zawartość każdego z rozdziału.

Wydaje mi się, że rozdział ten (tj. rozdział pierwszy) powinien być bogatszy w przypisy literaturowe – w obecnej formie zawiera jedynie pięć referencji (dot. nadprzewodnictwa w grafenie), co oznacza, że ciężar przypisów literaturowych jest przesunięty zatem na kolejne rozdziały.

**Rozdział drugi.** W rozdziale tym doktorant opisuje metody obliczeniowe fizyki ciała stałego: metody z zasad pierwszych (sekcja II.1), metody półempiryczne (sekcja II.2), oraz teorię funkcyjności gęstości (sekcja II.3). Nie jestem w pełni przekonany, czy opisanie wszystkich z tych metod w tym rozdziale było konieczne, tym bardziej, że niektóre z nich nie były wykorzystane w pracy naukowej doktoranta. Niemniej doceniam odważną próbę „krótkiego” opisu każdej z metod.

W na stronie 17 znajdujemy polski zapis imienia M. Borna jako Maks (zdrobnienie od Maksymiliana?), natomiast na stronie 18 zapis imienia J. Slatra jako John, a nie jako polski Jan. Wskazanie jest stosowanie jednej konwencji, i (raczej) powinien to być oryginalny zapis imienia.

Opisy zawarte w tym rozdziale są raczej jasne. Najważniejsza sekcja (dot. teorii funkcyjności gęstości elektronowej) zakończona jest opisem różnego typu (pseudo)potencjałów. Brakuje dokładniejszego wyjaśnienia dot. np. meta-GGA – prosiłbym o takowe podczas obrony. Sekcja kończy się stwierdzeniem, że „dobór odpowiednich pseudopotencjałów do obliczeń metodami DFT jest skomplikowany” – proszę o uzasadnienie tego stwierdzenia, oraz propozycję jak odpowiedni pseudopotencjał powinien być wybrany.

**Rozdział trzeci.** Rozdział zawiera uzupełnienie poprzedniego, dot. stanu nadprzewodzącego. Znajdziemy tu opis tego zjawiska w ramach teorii Ginzburga-Landaua (III.1), Bardeena-Coopera-Schrieffera (III.2), oraz Migdala-Eliashberga (III.3).

Wstęp do rozdziału zawiera informacje dot. nadprzewodników, w kontekście ich własności eksperymentalnych. Niestety autor pomija ty aktualnie badane nadprzewodniki na bazie żelaza, co sugeruje, że relatywnie „stare” źródło informacji dla tej sekcji. Ta sekcja prezentuje również podział nadprzewodników: (a) ze względu na  $T_c$  – nisko- i wysokotemperaturowe, (b) ze względu na interakcję z zewnętrznym polem magnetycznym – I i II rodzaju. Pominięto niestety podział, ze względu na rodzaj



INSTYTUT  
FIZYKI  
JĄDROWEJ

im. Henryka  
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ  
AKADEMII  
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,  
prof. IFJ PAN  
Zakład Komputerowych  
Badań Materiałów

mechanizmu parującego lub symetrię szczeliny nadprzewodzącej (konwencjonalne i niekonwencjonalne) – co wydaje mi się szczególnie istotne w kontekście stosowanych metod numerycznych (które ograniczone są jedynie do konwencjonalnych nadprzewodników, opisanych formalizmem równań Eliashberga).

W sekcji III.3 przedstawiono główne wyniki teorii Bardeena-Coopera-Schrieffera (BCS). Równanie III.8 prezentuje Hamiltonian mikroskopowym, natomiast równanie III.9 „funkcję nadprzewodzącej przerwy energetycznej” (tj. równanie na szczelinę nadprzewodzącą). Niestety brakuje mi tutaj odpowiedniego odpisuj, jak z równania III.8 przejść do III.9, choć autor stwierdza „Następstwem analizy tego Hamiltonianu (III.8) jest funkcja nadprzewodzącej przerwy energetycznej (III.9)”. Lepszy opis tej części stanowiłby lepsze wyjaśnienie dla kolejnych zależności, (np. równanie III.19) które stanowi chyba najważniejszy wynik teorii BCS.

W sekcji III.3 autor prezentuje teorię Migdala-Eliashbera. Sekcja kończy uwaga „W formalizmie równań Eliashberga relacje dyspersji są dane arbitralnie\* ” przy czym przypis wyjaśnia, że „formalizm jest oparty o najprostszy model Debye’a ciała stałego, lecz istnieje możliwość wykorzystania innego, bardziej adekwatnego dla konkretnego problemu”. Wydaje mi się, że konieczny byłby tutaj rozszerzony opis jak to bardziej adekwatne modele mogą być zastosowane – proszę o komentarz w trakcie publicznej obrony.

**Rozdział czwarty.** W rozdziale doktorant przedstawia opis „schemat” obranej metody badawczej. W przeciwieństwie do poprzednich rozdziałów nie jest poprzedzony wstępem. Sekcja IV.1 opisuje wybrane strukturę dwuwymiarowe, oraz ich podstawowe własności. W sekcji IV.2, po raz drugi pojawia się „teoria funkcjonału gęstości”, jednak tym razem w kontekście praktycznego zastosowania. Część opisów, w mojej opinii, powinna być zamieszczona w rozdziale poprzednim (dot. DFT) – np. opis pseudopotencjałów. Mam wątpliwości czy pojęcia „struktura elektronowo-fononowa” jest właściwe w kontekście oddziaływania elektron-fonon – może sugerować, że chodzi (jedynie) o relacje dyspersyjne elektronów i fononów. W kontekście obliczeń „fononowych” mową jedynie o perturbacyjnej teorii funkcjonału gęstości (DFPT) – brak komentarza dot. innych istniejących metod. Proszę o taki omówienie w trakcie obrony. Rysunek IV.3 prezentuje schemat blokowy „obliczeń” – nie jestem pewny czemu obliczenia DFPT miałyby być wykonane „po” kroku obliczeń nie-samozgodnych (NSCF). Proszę o wyjaśnienie w trakcie obrony. Sekcja IV.3 opisuje (ponownie) formalizm równań Eliashberga – chyba część treści powinna być w poprzednim rozdziale dot. adekwatnej metody. Brakuje mi tu jasnej informacji, które parametry (i jak) uzyskane z obliczeń DFT są wykorzystywane w tych rachunkach.



INSTYTUT  
FIZYKI  
JĄDROWEJ

im. Henryka  
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ  
AKADEMII  
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,  
prof. IFJ PAN  
Zakład Komputerowych  
Badań Materiałów

**Rozdział piąty i szósty.** W moim odczuciu rozdziały te stanowią główną część rozprawy – prezentują bowiem wyniki uzyskane przez doktoranta (dla wybranych związków  $C_6XC_6$ ,  $XC_6$  i  $XC_8$ , oraz  $P_8CaP_8$ ). Wydaje mi się, że w rozdziale piątym sekcje powinny być zamienione miejscami, tak aby przejść z układów „prostych” do bardziej złożonych. Można również oczekiwać, że sekcja dot.  $C_6XC_6$  będzie bardziej powiązana z rozdziałem kolejnym dot.  $P_8CaP_8$ , niż sekcja dot.  $XC_6$  i  $XC_8$ .

Przez domieszkę rozumiałbym tu układ  $C_{6-x}Y_x$ , natomiast w części tej mamy raczej do czynienia grafenem dekorowanym przez atom Y (w rozprawie atom X na rys. V.12) – mowa więc o nowym układzie a nie domieszkowaniu starego (podobny problem występuje również w kolejnych rozdziałach – dla przykładu tytuł sekcji VI.1: *warstwa fosforenu domieszkowana wapniem*). W trakcie obrony proszę o omówienie/wyjaśnienie lub argumentację użytego nazewnictwa.

Rysunek V.3 porównuje gęstości stanów (DOS) dla różnych układów – czystego i „domieszkowanego”. Wydaje mi się, że taka prezentacja DOSów (gdzie wspólnym „elementem” jest poziom Fermiego) jest błędna. Wzbogacenie czystego układu (np. podwójna warstwa grafenu) o nowy element (w tym przypadku atom pomiędzy warstwami – co jest równoznaczne ze zwiększeniem liczby elektronów w układzie) powoduje przesunięcie poziomu Fermiego do „wyższych wartości” energii (podobnie jak zmniejszenie liczby elektronów powodowałoby przesunięcie do „niższych wartości” energii). Oznacza to, że „elementem wspólnym” prezentowanych DOSów nie powinien być poziom Fermiego, a najgłębiej położone stany energetyczne. Dodatkowa (i konieczna) informacja w tym przypadku byłaby związana z „prawidłowym” położeniem poziomu Fermiego dla obu przypadków. Widać to, gdy porównamy czerwone i niebieskie linie na każdym panelu – główny charakter DOSów jest identyczny – krzywe (czerwona i niebieska) praktycznie by się pokrywały, a różnica pomiędzy nimi dawała by dodatkowe informacje nt. wpływu dodatkowego elementu (tj. atomu pomiędzy warstwami) na DOS elektronowy. Jeśli to możliwe proszę o takie omówienie (i nową wersję rys. V.3) podczas obrony. Identyczną analizę można by przeprowadzić dla elektronowej struktury pasmowej, gdzie dodatkowe pasma była by głównie związane z nowym atomem (podobnie jak analizujemy struktury pasmowe dla układów ziem rzadkich, w przypadku uwzględnienia lub nie stanów f w obliczeniach). Niestety takiego porównania nie przedstawiono w rozprawie, co mogłoby być dosyć ciekawe. Dla przykładu na rys. V.3 widzimy rozszczepienie piku w DOS (czerwona linia ok. 1.5 eV  $\rightarrow$  niebieska linia ok. 0 eV). Podobnie, otwarte jest pytanie o relacje dyspersyjne fononów dla badanych układów – o ile prezentowany jest DOS fononowy (rys. V.4), to krzywe dyspersji zostały pominięte, choć mogłyby stanowić cenne uzupełnienie.



**INSTYTUT  
FIZYKI  
JĄDROWEJ**

**im. Henryka  
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ  
AKADEMII  
NAUK**

**w Krakowie**

dr hab. Andrzej Ptok,  
prof. IFJ PAN  
Zakład Komputerowych  
Badań Materiałów

Co ciekawe porównanie wspomnianych struktur elektronowych jest przedstawione dla układów  $XC_6$  i  $XC_8$  (Fig. V.13). Jednak powyższa uwaga dot. poziomu Fermiego jest ciągle aktualna. Dla obu krzywych prezentowanych na fig. V.13 (zielona i czarna) doszukiwać się można cech charakterystycznych dla sieci plastra miodu, tj. stożka Diraca w punkcie K – rzeczywiście występuje on, jednak dla różnych energii (ok -6 eV dla  $XC_6$  i -2 eV dla  $XC_8$ ). Jednak inne odniesieni względem poziomu „0” energii (poziomu Fermiego) utrudnia porównanie obu struktur pasmowych.

Rysunek V.15 porównuje relacje dyspersji dla  $XC_6$  i  $XC_8$  – o ile porównanie DOSów fononowych (prawa część paneli) może być jakoś uzasadniona (np. małą zmianą częstotliwości realizowanych przez większą część układu – tj. atomy węgla), to porównanie obu struktur pasmowych nie ma sensu. Jest to związane z różną ilością atomów w „komórce prymitywnej” (i różną ilością realizowanych gałęzi w strukturze pasmowej) – jest to niestety sytuacja całkowicie odmienna do porównywania elektronowych struktur pasmowych, gdzie takie porównanie jest uzasadnione.

Rysunek V.16 prezentuje krzywe funkcji spektralnej oraz stałe sprzężenia elektron-fonon. Brak mi wyjaśnienia, dlaczego funkcja spektralna jest „nieciąga” i realizowana przez zespół oddzielonych pików – czy jest to wynik zastosowanej metody, czy ma to głębsze uzasadnienie

Rozdział VI prezentuje wyniki dla układu bardziej skomplikowanego  $P_8CaP_8$  – stopień komplikacji wzrasta względem wcześniejszego układu  $C_6XC_6$ , co jest związane z brakiem płaskich płaszczyzn realizowanych przez fosforu.

Rysunek VI.4 w przeciwieństwie do poprzedniej sytuacji nie prezentuje porównania układu czystego i „domieszkowanego”. Mogłoby to umożliwić opis wpływu atomów wapnia na układ. Parcjalny DOS atomów wapnia jest nieporównywalnie mniejszy niż atomów fosforu – utrudnia to czytanie wykresów DOSu na tym rysunku (wartości parcjalnego DOS dla wapnia mogły być zwiększone 5 lub 10 razy, dla polepszenia czytelności). Podobny problem możemy znaleźć na wykresie DOSu fononowego na rys. VI.5.

**Rozdział ósmy** – prezentuje podsumowanie wyników badań prezentowanych w rozprawie. Autor stwierdza, że cel pracy został osiągnięty, a ja z tym wnioskiem się zgadzam.

**Uwagi końcowe.** W rozprawie pojawia się stwierdzenie „promień atomu” (np. w rozdziale ósmym) – czy takie pojęcie jest uzasadnione? Zastosowana numeracja równań i rysunków (zawierająca również numer rozdziału), może być myląca – bez podania dokładnej informacji, może być problem z identyfikacją „obiektu”, np. IV.3 – może być równaniem, rysunkiem, lub sekcją (co ciekawe wszystkie te „obiekty” znajdują się na tej samej stronie, s. 49).



INSTYTUT  
FIZYKI  
JĄDROWEJ

im. Henryka  
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ  
AKADEMII  
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,  
prof. IFJ PAN  
Zakład Komputerowych  
Badań Materiałów

Podsumowując, w przedłożonej rozprawie pan mgr. inż. Kamila Skoczylasa przedstawił oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, udokumentowane artykułami naukowymi. Rozprawa spełnia zatem ustawowe kryteria stawiane rozprawom doktorskim, w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk fizycznych. W związku z powyższym, wnoszę o dopuszczenie pan mgr. inż. Kamila Skoczylasa do publicznej obrony.

Zawarte w recenzji uwagi dotyczą głównie formy prezentacji uzyskanych wyników, jak się kwestii edycyjnych. Przedłożoną rozprawę uznaje za kompletną – autor wykazał się doskonałą znajomością zastosowanych technik obliczeniowych, a główne wyniki uzyskane przez doktoranta uznaję za wartościowe. W związku z powyższym wnoszę o wyróżnienie pracy doktorskiej pana mgr. inż. Kamila Skoczylasa.



INSTYTUT  
FIZYKI  
JĄDROWEJ

im. Henryka  
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ  
AKADEMII  
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptak,  
prof. IFJ PAN  
Zakład Komputerowych  
Badań Materiałów