

Streszczenie pracy doktorskiej

Rozprawa doktorska dotyczy zagadnienia indukcji stanu nadprzewodzącego w metalicznym wodorze oraz innych wybranych układach zawierających wodór (H_2S , H_5S_2 , H_4S_3 , LaH_{10} , C-S-H). Dysertacja składa się z siedmiu rozdziałów.

Rozdział pierwszy zawiera przegląd literatury przedmiotu. Głównie opiera się na publikacjach zawierających charakterystykę stanu nadprzewodzącego w wodorze i wybranych związkach bogatych w wodór.

Rozdział drugi prezentuje kwantowy opis właściwości fizycznych molekuly wodoru. Omówione rezultaty stanowią wstęp do pełnego zrozumienia sposobu opisu właściwości nadprzewodzących metalicznego wodoru.

W kolejnym rozdziale przeanalizowane zostały właściwości stanu nadprzewodzącego potencjalnie indukującego się w wodorze. Ze względu na olbrzymią złożoność matematyczną zagadnienia, obliczenia *ab initio* przeprowadzone zostały w ramach modelu dwóch skompresowanych płaszczyzn wodorowych. Zostały wzięte pod uwagę wszystkie istotne fizycznie kanały korelacji elektronowych (U oraz K). Uwzględnione zostały również nieklasyczne funkcje sprzężenia elektron-fonon (g_U oraz g_K), powiązane bezpośrednio z naważkowym i międzywęzłowym oddziaływaniem hubbardowskim.

Właściwości termodynamiczne stanu nadprzewodzącego określone zostały w ramach formalizmu Eliashberga. Na podstawie obliczeń *ab initio* wyznaczono postać izotropowej funkcji Eliashberga, a następnie parametry wejściowe do wzoru Allena-Dynesa. W rozdziale tym wykazano, że w badanym układzie może się indukować stan nadprzewodzący: w przybliżeniu harmonicznym o maksymalnej wartości temperatury krytycznej wynoszącej około 200 K, w bardziej dokładnym podejściu anharmonicznym 84 K ($F = 3 \text{ Ry}/a_0$). Udowodniono, że efektywna wartość deparujących korelacji elektronowych w metalicznym wodorze jest stosunkowo niska ($\mu_H^* \sim \mu_M^* \sim 0,17$) oraz bardzo słabo zależy od siły F . Na podstawie przeprowadzonych obliczeń stwierdzono, że poprawnie dobrana wartość μ^* istotnie obniża wartość temperatury krytycznej w stosunku do uzyskanej dla $\mu^* = 0,1$. Warto przy tym zwrócić uwagę, że obliczone wartości temperatury krytycznej dobrze korelują z wartościami literaturowymi oraz z maksymalnymi temperaturami krytycznymi zmierzonymi eksperymentalnie dla H_3S oraz LaH_{10} .

Wyznaczone parametry termodynamiczne stanu nadprzewodzącego w wodorze pomimo

wysokiego T_C przyjmują wartości, dla których bezwymiarowe stosunki termodynamiczne R_Δ , R_C , R_H oraz R_{H2} tylko nieznacznie odbiegają od wartości przewidywanych przez średniopolową teorię BCS.

Krytyczna analiza zagadnienia doprowadziła do wniosku, że indukcja stanu nadprzewodzącego w metalicznym wodorze o wartości T_C porównywalnej do temperatury pokojowej nie jest możliwa.

W rozdziale czwartym zaprezentowany został klasyczny elektronowo-fononowy formalizm Eliashberga, opierający się na analizie fazy nadprzewodzącej indukującej się w układzie YB₆. Układ ten wybrany został jako przykładowy jedynie w celu przedstawienia sposobu przeprowadzania analizy. Stan nadprzewodzący w związku YB₆ charakteryzuje się stosunkowo niską wartością temperatury krytycznej. Mimo to, jego własności termodynamiczne wyraźnie odbiegają od przewidywań modelu BCS. Fakt ten wiąże się ze znacznymi efektami silno-sprężeniowymi oraz efektami retardacyjnymi występującymi w heksaborku itru ($k_B T_C / \omega_{ln} \sim 0,1$).

Przedstawiony klasyczny formalizm Eliashberga był stosowany do opisu wysokotemperaturowych stanów nadprzewodzących w kolejnych rozdziałach rozprawy.

W rozdziale piątym pracy doktorskiej wyznaczone zostały właściwości termodynamiczne fazy nadprzewodzącej układu H₅S₂ w ramach klasycznego formalizmu Eliashberga. Otrzymano bardzo wysokie wartości pseudopotencjału kulombowskiego (μ^*). Następnie rozwinięto klasyczną analizę Eliashberga, biorąc pod uwagę poprawki wierzchołkowe do oddziaływania elektron-fonon. Ponadto przeanalizowane zostały parametry stanu nadprzewodzącego indukowanego w układzie H₄S₃ oraz H₂S. Warto zauważyć, że oprócz wyników eksperymentalnych dla H₃S na diagramie $T_C - p$ istnieją również punkty eksperymentalne odpowiadające znacznie niższym wartościom T_C , które mogą pochodzić od innego związku. Potencjalnymi kandydatami są H₂S oraz H₅S₂ i H₄S₃. W ramach przeprowadzonych obliczeń wykazano, że H₂S jest odpowiedzialny za obserwowane eksperymentalnie nadprzewodnictwo w układzie siarka-wodór dla próbek przygotowanych w niskiej temperaturze.

Następny rozdział zawiera szereg ciekawych rezultatów i spostrzeżeń. Z uwagi na fakt, że w układzie o stechiometrii LaH₁₀ potwierdzono doświadczalnie indukcję stanu nadprzewodzącego o wartościach temperatury krytycznej bliskiej temperaturze pokojowej, w dysertacji wyznaczono parametry termodynamiczne tego nadprzewodnika. Wykazano, że stan nadprzewodzący charakteryzuje się silnym sprzężeniem elektron-fonon oraz nie jest typu BCS.

W rozdziale przedstawione zostały również kryteria, które w przyszłości mogą pomóc w znalezieniu materiału o pożądanych wysokotemperaturowych właściwościach nadprzewodzących. Przebadano wybrane związki o budowie typu La _{δ} X_{1- δ} H₁₀ (LaXH) pod kątem dobrania układu o jeszcze wyższej wartości temperatury krytycznej. Udowodniono, iż odpowiednie domieszkowanie układu może prowadzić do indukcji stanu nadprzewodzącego

w temperaturze pokojowej (potencjalnymi kandydatami są LaScH oraz LaYH).

Z uwagi na eksperymentalne potwierdzenie nadprzewodnictwa w temperaturze pokojowej w układzie C-S-H, pracę doktorską poszerzono o rozdział siódmy. Rozdział ten zawiera analizę możliwych scenariuszy odpowiedzialnych za indukcję nadprzewodnictwa w układzie C-S-H. Wykazano, że stan nadprzewodzący w C-S-H może być indukowany przez silne oddziaływanie elektron-fonon, tak jak w przypadku nadprzewodników LaH₁₀, H₃S oraz YH₆. Wysoka wartość $\omega_{ln}/k_B = 7150$ K, wyklucza realizację scenariusza pośredniego (lub słabego) sprzężenia elektron-fonon w badanym nadprzewodniku. Formalizm Eliashberga sugeruje niską wartość parametru Ginzburga-Landaua: $[\kappa]_{C-S-H} = 1,73$. Podobnie jak dla innych nadprzewodników wysokotemperaturowych zawierających wodór: $[\kappa]_{LaH_{10}} = 1,60$, $[\kappa]_{H_3S} = 1,53$, $[\kappa]_{YH_6} = 1,34$. W rozdziale przedstawiono wyniki, na podstawie których można stwierdzić, że wnioski Hirscha i Marsiglio wynikające z faktu przeprowadzenia obliczeń przy wykorzystaniu wzorów słabego sprzężenia elektron-fonon są niewłaściwe.

Dysertację kończy podsumowanie wyników, spis literatury naukowej oraz spis rysunków.

29.07.2021

Małgorzata Kostrewa