

Częstochowa, dn. 26.04.2021

mgr Kamila Krok
Katedra Fizyki Teoretycznej
Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych
Uniwersytet Humanistyczno-Przyrodniczy
im. Jana Długosza w Częstochowie
e-mail: kamila.szewczyk@ujd.edu.pl

Streszczenie rozprawy doktorskiej pod tytułem

Analiza stanu nadprzewodzącego poza standardowym schematem Eliashberga

Stan nadprzewodzący jest zjawiskiem, które zadziwia i fascynuje naukowców od czasów jego odkrycia w roku 1911 [1], aż po dzień dzisiejszy. Teorie, opisujące stan nadprzewodzący, takie jak: średniopolowa teoria Bardeena, Coopera i Schrieffera (BCS) [2, 3] oraz jej uogólnienie, czyli standardowa teoria Migdala-Eliashberga [4], były wielkim osiągnięciem fizyki ciała stałego. Modele te pozwoliły opisać właściwości wielu nadprzewodników. Fakt ten wynika stąd, że bardzo duża grupa materiałów posiada względnie prostą budowę strukturalną, co prowadzi do stosunkowo łatwego opisu ich właściwości elektronowych, fononowych i oddziaływania elektron-fonon. W związku z tym, aby pokazać jak wiele różnych układów fizycznych może być opisanych standardową (izotropową) teorią Migdala-Eliashberga, w pracy doktorskiej zaprezentowałam analizę stanu nadprzewodzącego w trzech materiałach: BaGe_3 [5, 6], HfH_2 [7, 8] i Cr_3RhN [9, 10, 11]. Nadprzewodniki te różnią się między sobą wieloma aspektami, takimi jak strukturą krystaliczną, strukturą elektronową oraz fononową. W pracy doktorskiej pokazałam, że układy te bardzo dokładnie mogą zostać opisane za pomocą izotropowej teorii Migdala-Eliashberga, czyli takiej w której samouzgodnienie rozwiązań równań Eliashberga występuje jedynie względem energii elektronowej oraz fononowej.

Nie wszystkie jednak nadprzewodniki wpisują się w ramy opisu izotropowego. Istnieją materiały, dla których teoretycznie wyznaczone właściwości stanu nadprzewodzącego nie zgadzają się z wynikami doświadczalnymi. Spowodowane to może być zbyt daleko idącymi przybliżeniami stosowanymi w standardowym formalizmie Eliashberga, takimi jak: przyjęcie stałej elektronowej gęstości stanów [12, 13], pominięcie zależności równań Eliashberga

od elektronowego wektora falowego (\mathbf{k}) [14, 15], uwzględnienie pseudopotencjału kulombowskiego (μ^*) - parametru, który dla niskich wartości interpretowany jest jako efektywne oddziaływanie Coulomba pomiędzy elektronami [16, 17]. Warto również wspomnieć o przybliżeniu nieskończenie szerokiego pasma elektronowego oraz założeniu do połowy wypełnionego pasma elektronowego [17]. Niebagatelne znaczenie ma też uwzględnienie twierdzenia Migdala [18], które zakłada, że poprawki wierzchołkowe do oddziaływania elektron-fonon są nieistotne. Wiele z wymienionych czynników może znacząco wpływać na właściwości stanu nadprzewodzącego niekonwencjonalnych nadprzewodników.

Przybliżeń występujących w standardowej teorii Migdala-Eliashberga jest wiele, a pominięcie ich wszystkich jest zadaniem niezwykle trudnym i skomplikowanym. W związku z tym w pracy doktorskiej zaprezentowałam pierwsze kroki wyjścia poza standardowy schemat Eliashberga. Mianowicie przedstawiłam samouzgodnioną analizę właściwości stanu nadprzewodzącego uwzględniając w obliczeniach elektronowy i fononowy wektor falowy oraz biorąc pod uwagę efekty nieadiabatyczne pochodzące od poprawek wierzchołkowych oddziaływania elektron-fonon.

W pierwszym kroku wyprowadziłam równania Eliashberga zależne jedynie od pędu elektronowego, badając anizotropowe właściwości stanu nadprzewodzącego [19]. W tym przypadku przeanalizowałam stan nadprzewodzący dla zróżnicowanego wypełnienia pasma elektronowego $\langle n \rangle \in \langle 0, 2; 1 \rangle$. Następnie zaprezentowałam analizę stanu nadprzewodzącego uwzględniając zmienne niezależne w teorii Eliashberga: elektronowy i fononowy wektor falowy oraz częstość Matsubary [20]. W tym przypadku przyjąłam, że względu na wyższy poziom skomplikowania układu równań, do połowy wypełnione pasmo elektronowe. Trudność w badaniu obu typów omawianych równań polega na wzięciu pod uwagę wszystkich anizotropowych właściwości rozważanych materiałów. Dlatego poddałam analizie względnie prosty układ fizyczny: dwuwymiarową sieć kwadratową. Pozwoliło to na bardzo dokładne zbadanie anizotropowych właściwości stanu nadprzewodzącego. Najważniejszym i niespotykanym dotąd w literaturze wynikiem tej analizy jest informacja o istnieniu niezbalansowanego stanu nadprzewodzącego w przypadku, gdy bierze się pod uwagę zależność równań od wektora falowego. Niezbalansowany stan nadprzewodzący, to stan dla którego wartość stałej sprzężenia w kanale diagonalnym energii własnej jest różna od wartości stałej sprzężenia w kanale Coopera (kanale niediagonalnym energii własnej). W pracy doktorskiej wykazałam, że rozwiązania równań Eliashberga zależne od wektora falowego charakteryzują się istotną niejednorodnością w przestrzeni pędu. Fakt ten jest bardzo często pomijany w rozważaniach dotyczących stanu nadprzewodzącego indukowanego przez liniowe oddziaływanie elektron-fonon. Może on być jednak szczególnie ważny w sytuacji, gdy poprawki wierzchołkowe do oddziaływania elektron-fonon są duże, ponieważ ich znaczenie determinowane jest przez zależność pędową funkcji $\Delta_{\mathbf{k}}$, $Z_{\mathbf{k}}$ oraz $\chi_{\mathbf{k}}$, będących rozwiązaniami równań Eliashberga [21, 22, 23, 24].

W następnym etapie wzięłam pod uwagę powszechnie stosowane twierdzenie Migdala

[18], uzasadniające pominięcie w równaniach Eliashberga wkładów pochodzących od poprawek wierzchołkowych oddziaływania elektron-fonon. Twierdzenie to mówi, że jeśli charakterystyczna energia fononów w badanym układzie fizycznym jest dużo mniejsza od energii charakterystycznej elektronów, to efekty nieadiabatyczne są nieistotne. Jednakże badania stanu nadprzewodzącego pokazują, że istnieją układy, takie jak układy fullerenowe [25, 26], wysokotemperaturowe miedziany [27, 28, 29], ciężko-fermionowe związki [30], nadprzewodniki znajdujące się pod wpływem silnego pola magnetycznego [31], czy też niskowymiarowe materiały [32, 33, 34, 35, 36, 37], które nie spełniają powyższego warunku, ze względu na relatywnie niską energię elektronów w stosunku do energii fononów, czy też wysoką wartość stałej sprzężenia elektron-fonon. Przykładem niskowymiarowego materiału, w którym indukuje się nieadiabatyczny stan nadprzewodzący, jest dwuwarstwa Li-hBN - układ złożony z dwóch heksagonalnych płaszczyzn składających się z atomów boru i azotu, interkalowanych atomami litu [38]. Analiza struktur elektronowych i fononowych pokazała, że materiał ten posiada energię Fermiego i częstość Debye'a wynoszącą odpowiednio $\varepsilon_F = 417,58$ meV i $\omega_D = 165,56$ meV [39, 40]. Sprzężenie pomiędzy elektronami i fononami osiąga wartość $\lambda = 1,17$ [41]. W konsekwencji prowadzi to do wysokiej wartości bezwymiarowego stosunku Migdala: $\lambda\omega_D/\varepsilon_F \sim 0,46$. Wynik ten sprawił, że postanowiłam zbadać nieadiabatyczny stan nadprzewodzący Li-hBN za pomocą dostępnych w literaturze uogólnionych izotropowych równań Eliashberga, uwzględniających poprawki wierzchołkowe do oddziaływania elektron-fonon w najniższym rzędzie [42]. Otrzymane rezultaty porównałam z wynikami uzyskanymi w ramach standardowego formalizmu Eliashberga, pokazując tym samym, że właściwości stanu nadprzewodzącego w tego typu materiałach powinny być wyznaczone przy pomocy formalizmu jawnie uwzględniającego poprawki wierzchołkowe, ze względu na ryzyko znacznego przeszacowania temperatury krytycznej [43]. Poza tym udowodniłam na przykładzie omawianego związku, że uwzględnienie kolejnych, wyższych rzędów poprawek wierzchołkowych do oddziaływania elektron-fonon jest zbędne, ze względu na nieznaczące zmiany w temperaturze krytycznej.

Rezultaty uzyskane podczas analizy nieadiabatycznego stanu nadprzewodzącego skłoniły mnie do wyjścia poza standardowy schemat Eliashberga, a mianowicie wyznaczenia pełnych równań Eliashberga zależnych od pędu i energii oraz uwzględniających poprawki wierzchołkowe oddziaływania elektron-fonon w najniższym rzędzie. Do wyprowadzenia wspomnianego układu równań wykorzystałam formalizm termodynamicznych funkcji Greena, rozwijając w tym przypadku macierzową funkcję Greena względem równań ruchu typu Matsubary w drugim rzędzie. Obliczenia te doprowadziły mnie do uzyskania spójnego, samouzgodnionego modelu nieadiabatycznego stanu nadprzewodzącego, nie omawianego do tej pory w literaturze. Analiza przedstawionych równań pokazuje, że pominięcie twierdzenie Migdala, nie tylko powoduje istnienie dodatkowych członów w równaniach Eliashberga, odpowiadających uwzględnieniu kolejnemu rzędowi poprawek wierzchołkowych, ale również modyfikuje standardowe człony rozważanych równań. Wyniku tego nie uwzględniono

w izotropowych równaniach Eliashberga [4], co czyni rezultat ten oryginalnym i niekonwencjonalnym.

Literatura

- [1] H. K. Onnes. The resistance of pure mercury at helium temperatures. *Communications Physical Laboratory of the University of Leiden*, 12:120, 1911.
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Microscopic theory of superconductivity. *Physical Review*, 106:162, 1957.
- [3] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Physical Review*, 108:1175, 1957.
- [4] G. M. Eliashberg. Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor. *Soviet Physics JETP*, 11:696, 1960.
- [5] E. Zurek and Y. Yao. Theoretical predictions of novel superconducting phases of BaGe₃ stable at atmospheric and high pressures. *Inorganic Chemistry*, 54:2875, 2015.
- [6] K. A. Szewczyk, E. A. Drzazga-Szcześniak, M. W. Jasrosik, K. M. Szcześniak, and S. M. Binek. The characteristic of the *s*-wave symmetry superconducting state in BaGe₃ compound. *Symmetry*, 11:977, 2019.
- [7] Y. Liu, X. Huang, D. Duan, F. Tian, H. Liu, D. Li, Z. Zhao, X. Sha, H. Yu, H. Zhang, B. Liu, and T. Cui. First-principles study on the structural and electronic properties of metallic HfH₂ under pressure. *Scientific Reports*, 5:11381, 2015.
- [8] A. M. Duda, K. A. Szewczyk, M. W. Jarosik, K. M. Szcześniak, M. A. Sowińska, and D. Szcześniak. Characterization of the superconducting state in hafnium hydride under high pressure. *Physica B: Condensed Matter*, 536:275, 2018.
- [9] B. Wiendlocha, J. Tobola, S. Kaprzyk, and D. Fruchart. Electronic structure, superconductivity and magnetism study of Cr₃GaN and Cr₃RhN. *Journal of Alloys and Compounds*, 442:289, 2007.
- [10] H. M. Tütüncü and G. P. Srivastava. Phonons and superconductivity in the cubic perovskite Cr₃RhN. *Journal of Applied Physics*, 112:093914, 2012.
- [11] K. M. Szcześniak, R. Szcześniak, D. Szcześniak, K. A. Szewczyk, A. M. Duda, and I. A. Domagalska. Study of superconducting phase in cubic anti-perovskite Cr₃RhN. *Physica C*, 442:289, 2017.
- [12] P. B. Allen and B. Mitrović. Theory of superconducting T_C . *Solid State Physics*, 37:1, 1993.
- [13] F. Jutier, G. A. Ummarino, J.-C. Griveau, F. Wastin, E. Colineau, J. Rebizant, N. Ma-

- gnani, and R. Caciuffo. Possible mechanism of superconductivity in PuCoGa_5 probed by self-irradiation damage. *Physical Review B*, 77:024521, 2008.
- [14] M. L. Kulić. Interplay of electron–phonon interaction and strong correlations: the possible way to high-temperature superconductivity. *Physics Reports*, 338:1, 2000.
- [15] E. G. Maksimov, M. L. Kulić, and O. V. Dolgov. Bosonic spectral function and the electron-phonon interaction in HTSC cuprates. *Advances in Condensed Matter Physics*, 2010:423725, 2010.
- [16] P. Morel and P. W. Anderson. Calculation of the superconducting state parameters with retarded electron-phonon interaction. *Physical Review*, 125:1263, 1962.
- [17] F. Marsiglio. Eliashberg theory of the critical temperature and isotope effect. Dependence on bandwidth, band-filling, and direct Coulomb repulsion. *Journal of Low Temperature Physics*, 87:659, 1992.
- [18] A. B. Migdal. Interaction between electrons and lattice vibrations in a normal metal. *Soviet Physics JETP*, 34:996, 1958.
- [19] K. A. Szewczyk, R. Szczyński, and D. Szczyński. Unbalanced superconductivity induced by the constant electron–phonon coupling on a square lattice. *Annalen der Physik*, 530:1800139, 2018.
- [20] K. A. Szewczyk, M. W. Jarosik, A.P. Durajski, and R. Szczyński. The unbalanced phonon–induced superconducting state on a square lattice beyond the static boundary. *Physica B: Condensed Matter*, 600:412613, 2021.
- [21] R. Combescot. Critical temperature of superconductors: Exact solution from eliashberg equations on the weak-coupling side. *Physical Review B*, 42:7810, 1990.
- [22] K. S. D. Beach, R. J. Gooding, and F. Marsiglio. Reliable Padé analytical continuation method based on a high-accuracy symbolic computation algorithm. *Physical Review B*, 61:5147, 2000.
- [23] O.V. Dolgov and V.V. Losyakov. Renormalization factor and odd- ω gap singlet superconductivity. *Physics Letters A*, 190:189, 1994.
- [24] J. Cai, X. L. Lei, and L. M. Xie. Vertex correction to the Eliashberg equation for the superconducting critical temperature. *Physical Review B*, 39:11 618, 1989.
- [25] L. Pietronero. Superconductivity mechanism in doped C_{60} . *Europhysics Letters*, 17:365, 1992.
- [26] W. E. Pickett. *in Solid State Physics, edited by H. Ehrenreich and F. Spaepen*. Academic, New York, 1993.
- [27] Y. J. Uemura, L. P. Le, G. M. Luke, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. H. Brewer, T. M. Riseman, C. L. Seaman, M. B. Maple, M. Ishikawa, D. G. Hinks, J. D. Jorgensen,

- G. Saito, and H. Yamochi. Basic similarities among cuprate, bismuthate, organic, chevreel-phase, and heavy-fermion superconductors shown by penetration-depth measurements. *Physical Review Letters*, 66:2665, 1991.
- [28] Y. J. Uemura, L. P. Le, G. M. Luke, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. H. Brewer, T. M. Riseman, C. L. Seaman, M. B. Maple, M. Ishikawa, D. G. Hinks, J. D. Jorgensen, G. Saito, and H. Yamochi. Basic similarities among cuprate, bismuthate, organic, chevreel-phase, and heavy-fermion superconductors shown by penetration-depth measurements [phys. rev. lett. 66, 2665 (1991)]. *Physical Review Letters*, 68:2712, 1992.
- [29] N D'Ambrumenil. An unconventional family tree. *Nature*, 352:472, 1991.
- [30] R. J. Wojciechowski. On the validity of the Migdal's theorem in the heavy fermion systems. *paper from: International Centre For Theoretical Physics*, 28:1, 1996.
- [31] H. Goto and Y. Natsume. A theoretical approach to strong-coupling superconductivity in ultra-high fields in consideration of vertex corrections to Eliashberg-Migdal equations. *Physica B*, 216:281, 1996.
- [32] G. Profeta, M. Calandra, and F. Mauri. Phonon-mediated superconductivity in graphene by lithium deposition. *Nature Physics*, 8:131, 2012.
- [33] J. Pešić, R. Gajić, K. Hinger, and M. Belić. Strain-enhanced superconductivity in Li-doped graphene. *Europhysics Letters*, 108:67005, 2014.
- [34] W. Wan, Y. Ge, F. Yang, and Y. Yao. Phonon-mediated superconductivity in silicene predicted by first-principles density functional calculations. *Europhysics Letters*, 104:36001, 2013.
- [35] J. Liao, Y. Zhao, H. Xud, and X. Yang. Phonon-mediated superconductivity in Mg intercalated bilayer borophenes. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19:29237, 2017.
- [36] Y. Ge, W. Wan, F. Yang, and Y. Yao. The strain effect on superconductivity in phosphorene: a first principles prediction. *New Journal of Physics*, 17:035008, 2015.
- [37] D. F. Shao, W. J. Lu, H. Y. Lv, and Y. P. Sun. Electron-doped phosphorene: A potential monolayer superconductor. *Europhysics Letters*, 108:6, 2014.
- [38] B. Altintas, C. Parlak, C Bozkurt, and R. Eryiğit. Intercalation of graphite and hexagonal boron nitride by lithium. *The European Physical Journal B*, 79:301, 2011.
- [39] J. Wang, F. Ma, and M. Sun. Graphene, hexagonal boron nitride, and their heterostructures: properties and applications. *Royal Society of Chemistry*, 7:16801, 2017.
- [40] A. Nagashima, N. Tejima, Y. Gamou, T. Kawai, and C. Oshima. Electronic structure of monolayer hexagonal boron nitride physisorbed on metal surfaces. *Physical Review Letters*, 75:3918, 1995.

- [41] N. H. Shimada, E. Minamitani, and S. Watanabe. Theoretical prediction of phonon-mediated superconductivity with $T_C \approx 25$ K in Li-intercalated hexagonal boron nitride bilayer. *Applied Physics Express*, 10:093101, 2017.
- [42] J. K. Freericks, E. J. Nicol, A. Y. Liu, and A. A. Quong. Vertex-corrected tunneling inversion in electron-phonon mediated superconductors: Pb. *Physical Review B*, 55:11651, 1997.
- [43] K. A. Szewczyk, I. A. Domagalska, A. P. Durajski, and R. Szczyński. Nonadiabatic superconductivity in Li-intercalated hexagonal boron nitride bilayer. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 11:1178, 2020.

Kamila Krok

.....*Kamila Krok*.....

(podpis)

