

Dr hab. Elżbieta Jartych, Prof. PL
Zakład Elektroniki i Fizyki Technicznej
Instytut Elektroniki i Technik Informacyjnych
Wydział Elektrotechniki i Informatyki
Politechnika Lubelska
ul. Nadbystrzycka 38 A
20-618 Lublin
e.jartych@pollub.pl

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Aleksandry Karoliny Jasek pt:
"Fale gęstości ładunkowej w nadprzewodnikach na bazie żelaza badane
metodą spektroskopii mössbauerowskiej"**

Rozprawa została przygotowana w Zakładzie Spektroskopii Mössbauerowskiej Instytutu Fizyki Uniwersytetu Pedagogicznego w Krakowie pod kierunkiem dr hab. inż. Artura Błachowskiego, profesora UP. Poświęcona jest nadprzewodnikowym związkom $Ba_{0,6}K_{0,4}Fe_2As_2$ i $SmFeAsO_{0,91}F_{0,09}$ oraz badaniu oddziaływań nadsubtelnych, których zmiany w obszarze przejścia fazowego zostały zaobserwowane za pomocą spektroskopii mössbauerowskiej. Praca oparta jest o 4 artykuły z lat 2014-2016 opublikowane w czasopismach: *Philosophical Magazine*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* i *Journal of Alloys and Compounds*, w których doktorantka jest wiodącym autorem. Ponadto znaczna część dysertacji poświęcona jest opisowi metodologii badań wypracowanej w grupie badawczej profesora Krzysztofa Ruebenbauera, zastosowanej w odniesieniu do skomplikowanych struktur magnetycznych w szeregu materiałów. Kilkanaście prac grupy zacytowanych w dysertacji zostało opublikowane w znaczących czasopismach naukowych na przestrzeni lat 1991-2016.

Recenzowana rozprawa doktorska dotyczy bardzo ciekawego problemu fizycznego, jakim jest nadprzewodnictwo w związkach zawierających żelazo. Powszechnie wiadomo, że domieszki magnetyczne w materiałach niszczą stan nadprzewodzący. Tematyka badań nadprzewodników zawierających żelazo została zapoczątkowana w 2008 r., jest ciągle aktualna i rozwijana intensywnie przez wiele ośrodków naukowych, wśród których grupa badawcza Zakładu Spektroskopii Mössbauerowskiej odgrywa znaczącą rolę.

Celem pracy doktorskiej było pokazanie, że spektroskopia mössbauerowska jest metodą badawczą czułą na przejście materiału ze stanu normalnego do stanu nadprzewodnictwa, a więc, że w określonym zakresie

temperatury zostaną zaobserwowane jakieś zmiany parametrów oddziaływań nadsubtlenych wyznaczone dzięki tej metodzie.

Rozprawa zawiera: 97 stron, 27 rysunków, 2 tabele i 41 wzorów. Opatrzona jest wykazem literatury zawierającym 74 pozycje opublikowane głównie w latach 1984-2016, kilka starszych prac cytowane jest ze względów historycznych. Tekst rozprawy podzielono na 3 części. W pierwszej z nich krótko opisano podstawowe wiadomości z zakresu nadprzewodnictwa oraz rodziny nadprzewodników na bazie żelaza, z których wybrano materiał do badań. Część druga, stanowiąca połowę rozprawy, ma charakter opracowania monograficznego i poświęcona jest podstawom spektroskopii mössbauerowskiej, oddziaływaniom nadsubtelnym oraz zagadnieniom modulacji gęstości ładunkowej i spinowej. Jest to zwięzłe i kompetentne przedstawienie problemu zastosowania spektroskopii mössbauerowskiej do badań skomplikowanych struktur magnetycznych, takich jak fale gęstości spinowej czy spiralne struktury magnetyczne. W ostatniej części Autorka opisuje szczegóły preparatyki próbek i przeprowadzonych pomiarów oraz dyskutuje wyniki uzyskane za pomocą spektroskopii mössbauerowskiej. Parametry otrzymane z widm mössbauerowskich przedstawione są w funkcji temperatury, co jest bardzo pomocne w zauważeniu przewidywanych zmian tych parametrów w obszarze przejścia fazowego. Rozprawa kończy się podsumowaniem i wnioskami.

Badania przeprowadzono kompleksowo i systematycznie. Bardzo starannie dobrano odpowiednie warunki technologiczne w celu zachowania stechiometrii składu chemicznego i otrzymania próbek o wysokiej jakości struktury krystalicznej i jednorodności, co potwierdza jakość zarejestrowanych widm mössbauerowskich. W oparciu o uzyskane widma mössbauerowskie starannie przeprowadzono ich analizę numeryczną stosując formalizm całki transmisji uwzględniający modulację elektronowej gęstości ładunkowej oraz modulację gradientu pola elektrycznego. Do najważniejszych osiągnięć rozprawy zaliczam:

- odkrycie niewspółmiernej modulacji gęstości ładunkowej i fal gradientu pola elektrycznego EFGW w związkach $Ba_{0,6}K_{0,4}Fe_2As_2$ i $SmFeAsO_{0,91}F_{0,09}$; w sytuacji braku obliczeń *ab initio* fali gradientu pola elektrycznego, pokazanie, że za pomocą spektroskopii mössbauerowskiej można takie fale wykryć i opisać odpowiednimi parametrami, stanowi bardzo duże osiągnięcie naukowe; w tym zakresie przeprowadzone badania należy uznać za pionierskie;
- pokazanie, że fale gęstości ładunkowej i fale gradientu pola elektrycznego zależą od temperatury i w obszarze przejścia fazowego parametry tych fal wykazują widoczne fluktuacje;
- odkrycie, że sposób domieszkania związków nadprzewodzących na bazie żelaza wpływa na zachowanie dyspersji gęstości ładunkowej na jądrach żelaza i

kształt fali gradientu pola elektrycznego podczas przejścia ze stanu normalnego do stanu nadprzewodzącego.

Reasumując, cel pracy doktorskiej został w pełni osiągnięty, ponieważ zaobserwowano w funkcji temperatury zmiany szeregu parametrów otrzymanych z widm mössbauerowskich, takich jak: przesunięcie izomeryczne S , szerokość linii widmowej Γ , amplitudę i parametr kształtu fali gradientu pola elektrycznego A i β .

Uwagi krytyczne:

W części I zabrakło informacji dla macierzystego związku SmFeAsO – temperatury Néela i wartości średniego momentu magnetycznego w Tabeli 1 oraz diagramu fazowego podobnie jak dla związku BaFe_2As_2 .

W części II napisano, że rozdział jest poświęcony dyskusji podstaw spektroskopii mössbauerowskiej. Raczej nie „dyskutuje się podstaw” tylko je przedstawia. Ponadto w tej części Autorka stosuje nazewnictwo nieco inne niż do tego przyzwyczajeni są fizycy doświadczalnicy, np. frakcja bezdrutowa – zamiast współczynnika Lamba-Mössbauera, a cały rozdział jest napisany dosyć hermetycznym językiem zrozumiałym dla specjalistów, zwłaszcza teoretyków kwantowych (np. energia rzutowana na atom).

W części III w podrozdziale 3.2 dotyczącym związku $\text{SmFeAsO}_{0,91}\text{F}_{0,09}$ powołano się na Rys. 6. Nie wiadomo czy to jest Rys. 6 z pracy doktorskiej Autorki (raczej nie, bo na str. 19 widzimy diagram fazowy dla nadprzewodnika z rodziny „122”), czy z cytowanych prac [56, 57]? Ponadto podatność magnetyczna podana jest w postaci $-1(0,1)$ zamiast $-1(\pm 0,1)$. W podrozdziale 3.5 mowa jest o „szerokiej składowej” w widmach mössbauerowskich związku $\text{Ba}_{0,6}\text{K}_{0,4}\text{Fe}_2\text{As}_2$. Można by tę składową zaznaczyć na rysunkach. W opisie Rys. 18 i 24 wskazano na „gwałtowne” zmiany kształtu widma mössbauerowskiego w odpowiednich zakresach temperatur. Tylko wprawne oko specjalisty wypatrzy tak subtelne zmiany kształtu i nazwie je „gwałtownymi” (w podpisie Rys. 24 określenie już wzięto w cudzysłów). Uwaga ta nie jest zarzutem, ponieważ wyznaczone z widm parametry już wykazują widoczne zmiany w obszarze przejścia fazowego.

Pewne zastrzeżenia budzi redakcja pracy. Zdarzają się drobne usterki i nieścisłości, głównie o charakterze technicznym lub językowym, tj.:

- powtórzenia: informacja o odkryciu H. K. Onnes’a (str. 9 i 12), h – stała Plancka podzielona przez 2π (str. 22 i 28), SDW – spin density wave (str. 17 i 49);
- stylistycznie niepoprawne, żargonowe sformułowania: „struktura silnie warstwowa” (str. 16), „Niestety życie jest nieco bardziej złożone” (str. 22),

„Trik polega na tym” (str. 22), „bardzo daleko na naszej skali odległości”, „a drugie jest też nieźle spełnione” (str. 23), „aby wyśredniować do zera” (str. 27), „zależy on trochę” (str. 28), „pole indukcji magnetycznej na jądrze” (str. 31), „spektroskopia mössbauerowska widzi oddziaływania nadsubtelne” (str. 32), „hamiltoniany (15) i (16) są oczywiście hermitowskie” (str. 33), „wyrażenie (18) zmierza do zera” (str. 34), „słabo widzą otoczenie chemiczne tego atomu” (str. 59), „szeroka składowa” (str. 65-66);

- błędy w imionach i nazwiskach: Heike Kamerlingh Onnes (por. na str. 9 i 12), Robert Schrieffer (por. na str. 14 i 90).

- w pracy pisanej w języku polskim opisy osi na rysunkach powinny być po polsku; symbol dziesiętny powinien być przecinkiem.

Pomimo drobnych zastrzeżeń natury merytorycznej i redakcyjnej **rozprawę doktorską mgr Aleksandry Karoliny Jasek oceniam bardzo wysoko i wnioskuję o dopuszczenie jej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

Z uwagi na aktualność i znaczenie badań naprzewodnikowych związków na bazie żelaza, zarówno pod względem poznawczym jak i aplikacyjnym, a także uwzględniając staranność i wielki wkład pracy wniesiony przez Doktorantkę w przeprowadzenie badań, opracowanie wyników pomiarów oraz opublikowanie ich w czasopismach o wysokim Impact Factor wnioskuję o wyróżnienie niniejszej rozprawy.

Lublin, 19.08.2016

Elżbieta Jartych