



Masarykova univerzita v Brně

Přírodovědecká fakulta

Ústav fyziky kondenzovaných látek

Kotlářská 2

611 37 Brno

tel. 532146113, fax 05 41211214

jschmidt@physics.muni.cz

b. s. KB Brno-město, č. ú. 85636621/0100
IČO 216224, DIČ CZ00216224

Posudek disertační práce pana Mgr. Břetislava Šopíka s názvem Superconductivity in disordered systems

Disertační práce pana Šopíka se skládá ze dvou volně spojených částí. První se týká supravodivosti v diamantu legovaném bórem, druhá základních rovnic teorie supravodivosti, jednotlícím prvkem je formalismus Greenových funkcí.

Téma první části je aktuální: supravodivost v legovaných polovodičích byla objevena teprve před šesti lety a jde o dynamicky se rozvíjející oblast. Téma druhé části je – vzhledem k tomu, že jde o základy – nadčasové. Poznatky mohou být ovšem použitelné i v moderních oblastech výzkumu, jako je fyzika tzv. pseudogapu ve vysokoteplotních supravodičích nebo supratekutost ve fermionových plynech.

Cílem první části je objasnit pozorovanou závislost kritické teploty supravodivého přechodu (T_c) na koncentraci bóru a pozorované rozdíly mezi vzorky připravenými různými postupy.

Pan Šopík po krátkém úvodu komentuje rovnice použité pro výpočet T_c : tzv. Mc. Millanovu formuli a méně známou Belitzovu formuli. Dále představuje postup výpočtu hustoty stavů obsahující metodu těsné vazby pro kubickou mříž a jeden orbital na atom, aproximaci koherentního potenciálu (CPA) a aproximaci DCA (dynamical cluster) a jednoduchý předpoklad o statistickém rozdělení atomů bóru. Nejvýznamnější výsledky jsou:

(Ia) metoda DCA vede k satelitům příměsového pásu odpovídajícím stavům dimerů boru a
(Ib) k mírnému nárůstu hustoty stavů na Fermiho energii ve srovnání s CPA.

(Ic) Nástup T_c s rostoucí koncentrací bóru nelze popsat pomocí BCS teorie supravodivosti, z čehož vyplývá, že jde o systém se silnou elektron-fononovou interakcí.

(Id) Závislost T_c na koncentraci bóru pro objemové vzorky a pro vrstvy s orientací 100 lze proložit pomocí Belitzovy formule, přičemž odhad vstupních parametrů je postaven na několika jednoduchých fyzikálních předpokladech a na výsledcích výpočtů ab-initio.

Pro vrstvy s orientací 111 ovšem výsledky získané tímto postupem nejsou v souladu s experimentem, experimentální závislost roste rychleji než vypočtená.

(Ie) Rozdíl mezi vrstvami 100 a 111 lze interpretovat na základě předpokladu, že vrstvy 100 obsahují podstatně vyšší koncentraci dimerů bóru. Korelace v polohách atomů bóru jsou popsány na úrovni aproximace DCA.

Uvedené výsledky jsou, pokud je mi známo, původní, pan Šopík k nim dospěl samostatně a považuje je, zejména jejich kvalitativní aspekty (například porovnání případů s dimery bóru a bez dimerů) za zajímavé a důležité pro pochopení supravodivosti v legovaných polovodičích. Nemám zkušenosti s výpočty na úrovni DCA, ale z práce usuzuji, že jsou poměrně náročné a že zde pan Šopík prokázal kromě obratnosti v zacházení s rovnicemi také zručnost při řešení numerických problémů.

Mám následující připomínky/dotazy.

1. Obrázek 6.4 obsahuje hodnoty pseudopotenciálu μ stanovené na základě dat T_c , s využitím McMillanovy formule a Belitzovy formule. Jak je možné, že hodnoty získané s využitím McMillanovy formule nedávají v obr. 6.5 výsledky v souladu s McMillanovou formulí?

2. Pro vrstvy 111 výsledky v souladu s Belitzovou formulí nejsou, což je interpretováno jako projev neadekvátnosti teorie pro popis systémů, kde je supravodivost podmíněna

neuspořádáním. Lze kvalitativně vysvětlit, proč postup v případě vrstev 100 dává přijatelné výsledky?

Výchozím bodem části II je kritika aproximace Galitského a Feynmana a její jednodušší varianty – aproximace Kadanoffa a Martina. Obě vysvětlují nestabilitu normálního stavu směrem k supravodivému uspořádání. První ale nevede ke vzniku energiové mezery ve známém tvaru, druhá sice dává energiovou mezeru, ale supravodivý stav není, jak je ukázáno, na této úrovni stabilní vzhledem ke vzniku nezkondenzovaných Cooperových párů.

Panu Šopíkovi se podařilo

(IIa) upravit formalismus Galitského a Feynmana tak, že výsledné rovnice již vedou k energiové mezeře v supravodivém stavu.

(IIb) Ukázat, že teorie je v souladu s požadavky formulovanými Kadanoffem a Baymem, které musí být splněny, aby byl popis v souladu se zákony zachování.

(IIc) Ukázat, že základní stav je v rámci teorie stabilní vzhledem ke vzniku nezkondenzovaných párů.

Navržená úprava teorie Galitského a Feynmana je mimořádně originální a zajímavá, zásluhou pana Šopíka, Pavla Lipavského a spolupracovníků je takto zacelena významná mezeře v oblasti základů fyziky supravodivosti.

Ke druhé části mám následující připomínky/dotazy.

3. V textu pod rovnicí (10.20) stojí, že se teorie v případě supravodivého stavu asymptoticky blíží Eliashbergově teorii. Přejít od navržené teorie k Eliashbergově teorii (a případně naopak) měl být, podle mého názoru, podrobně vysvětlen.

4. Z úvah na konci strany 81 vyplývá, že stavy s nezkondenzovaným párem jsou od základního stavu supravodiče odděleny mezerou o velikosti A , což zajišťuje splnění Landauova kritéria. Neuvažujeme-li o Coulombovské interakci, měla by ale disperzní relace longitudinálních excitací supravodiče začínat, pro malé hodnoty velikosti vlnového vektoru, lineárně, viz například kapitola 8.6 ve Schriefferově učebnici (J. R. Schrieffer, Theory of Superconductivity, Addison-Wesley, Reading, 1964.). Není zde rozpor se zmíněnou mezerou o velikosti A ?

5. Vlastní text disertace se týká pouze obecných vlastností teorie, přiložený preprint "Conserving T-matrix theory of superconductivity" však obsahuje vypočtený fázový diagram jednoduchého modelu. Preprint neobsahuje popis výpočtů. Prováděl je přímo pan Šopík? Pokud ano, mohl by se k nim v rámci obhajoby stručně vyjádřit?

Práce má přehlednou strukturu, je napsána přijatelnou angličtinou a je čtivá. V některých místech je text příliš stručný (viz např. bod 3 výše), k závěrům na konci první i druhé části bylo mohlo být zařazeno pár řádků výhledu.

Závěrem konstatuji, že práce obsahuje zajímavé a významné nové poznatky, a prokazuje předpoklady pana Šopíka k samostatné tvořivé vědecké práci.

V Brně dne 16. září 2010

doc.Mgr. Dominik Munzar, Dr.
ÚFKL PřF MU