

Prof. dr hab. Tadeusz Domański
Katedra Fizyki Teoretycznej
Instytut Fizyki
Uniwersytet M. Curie-Skłodowskiej
20-031 Lublin

Lublin, 4 stycznia 2024 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej magistra Gabriela Kuderowicza pt.
**„Badanie oddziaływania elektron-fonon i nadprzewodnictwa
w wybranych materiałach metodami ab initio”**

Przedłożona rozprawa doktorska dostarcza opisu widma elektronowego i fononowego oraz sprzężenia elektronów z fononami uzyskanego na podstawie obliczeń funkcjonału gęstości. Analizę przeprowadzono w kontekście realizacji stanu nadprzewodzącego indukowanego oddziaływaniem elektronowo-fononowym dla wybranych materiałów z rodziny faz Heuslera oraz domieszkowanych półprzewodników SnTe i PbTe. Na podkreślenie zasługuje ściśle odniesienie przeprowadzonych obliczeń do wyników doświadczalnych. Głównym osiągnięciem Doktoranta jest przeprowadzenie zaawansowanych obliczeń numerycznych w ramach podejścia funkcjonału gęstości uogólnionego na przypadek stanu nadprzewodzącego.

Praca doktorska została przygotowana w Katedrze Fizyki Materii Skondensowanej na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie. Promotorem rozprawy jest dr hab. inż. Bartłomiej Wiendlocha, prof. AGH. Na treść rozprawy składają się trzy bloki tematyczne, które obejmują: część wstępną o charakterze metodologicznym (rozdziały 1-4), zasadniczy opis oryginalnych wyników uzyskanych na podstawie obliczeń przeprowadzonych przez Doktoranta dla wybranych rodzajów materiałów (rozdziały 5-8) oraz podsumowanie i dodatki techniczne. Mgr Kuderowicz jest współautorem siedmiu opublikowanych artykułów i przedstawił kilkanaście wystąpień konferencyjnych. W dalszej części przedstawię przegląd ważniejszych wyników i postaram się ocenić ich wartość merytoryczną.

Rozdział pierwszy daje ogólny zarys teorii funkcjonału gęstości. Doktorant nawiązał do twierdzenia Hohenberga-Kohna i przedstawił sformułowanie równań Kohna-Shama. Przedyskutował następnie metodę oszacowania funkcjonału korelacyjno-wymiennego dla układu jednorodnego przy pomocy przybliżenia lokalnej gęstości (LDA) a także koncepcję uogólnienia na realistyczne przypadki z uwzględnieniem różnych poprawek gradientowych. Uwzględnił też spinowo-zależne rozkłady gęstości w układach z magnetyzacją oraz przedstawił schemat podejścia relatywistycznego opartego na równaniu Diraca. Sposoby wyznaczania struktury elektronowej przedstawiono w rozdziale drugim. W tym kontekście Doktorant wskazał możliwość oraz omówił zakres stosowności opisu elektronów Blocha w reprezentacji fal płaskich. Przedyskutował następnie praktyczne algorytmy analizy elektronów rdzeniowych i walencyjnych, między innymi za pomocą metody linearyzowanych stowarzyszonych fal płaskich (LAPW) i różnych sformułowań metody pseudopotencjału. Doktorant poruszył też ważne zagadnienia uwzględnienia wpływu drgań sieci krystalicznej, które mogą prowadzić do przemian strukturalnych i wskazał problem wyznaczania konfiguracji położenia atomowych, odpowiadających minimum energii całkowitej układu. Szczegóły opisu drgań sieci krystalicznej przedstawiono w rozdziale trzecim. Wychodząc z przybliżenia adiabaticznego Doktorant przypomniał schemat klasycznego podejścia do analizy drgań sieci, gdzie w oparciu o macierz dynamiczną określane są gałęzie modów typu akustycznego i optycznego. Przedstawił dwie metody (bezpośrednią i perturbacyjną) algorytmów służących do wyznaczenia fononowych zależności dyspersyjnych i fononowej gęstości stanów. Kluczowe znaczenie dla analizy mechanizmu nadprzewodnictwa ma sprzężenie elektronowych i fononowych stopni swobody. Elementy macierzowe efektywnego oddziaływania elektron-fonon można wyznaczyć na podstawie wkładu elektronowego do macierzy dynamicznej. W ramach perturbacyjnej teorii funkcjonału gęstości w bazie fal płaskich obliczenia numeryczne wykonywano przy użyciu pakietu Quantum Espresso.

Rozdział czwarty przedstawia przegląd zagadnień dotyczących nadprzewodnictwa fononowego. Doktorant wymienił podstawowe właściwości stanu nadprzewodzącego oraz podał zarys mikroskopowej teorii Bardeena, Coopera i Schrieffera (BCS). Ważnym elementem przeprowadzonej analizy było wskazanie mechanizmu parowania elektronów indukowanego wymianą fononów. W tym kontekście Doktorant przedstawił argumentację Fröhlicha opartą na transformacji kanonicznej, która z dokładnością do wyrazów liniowych rozspręga układ elektronowy od fononowego [wzór (4.20)] generując efektywny potencjał oddziaływań przyciągających w obszarze wokół powierzchni Fermiego. W kolejnym kroku uwzględniono efekty retardacyjne w ramach podejścia typu Eliashberga. Doktorant wskazał wzajemną relację izotropowej funkcji Eliashberga $\alpha^2F(\omega)$ z elementami macierzowymi oddziaływania elektronowo-fononowego, które są komplementarnie określone równaniami Kohna-Shama. Schemat uogólnienia teorii funkcjonału gęstości na stan nadprzewodzący przedstawiono w podrozdziale 4.4, podkreślając konieczność samo-

zgodnego wyznaczenia parametru porządku $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ oprócz zwykłej gęstości elektronowej oraz jonowej. Odpowiedni warunek w podejściu Kohna-Shama uzyskuje się poprzez uwzględnienie anomalnych wyrazów [wzór (4.63)] członu korelacyjno-wymiennego. Z minimalizacji potencjału termodynamicznego otrzymuje się wówczas równania Bogoliubova de Gennesa (4.73) i (4.74), które określają amplitudę cząstkową $u_i(\mathbf{r})$ i dziurową $v_i(\mathbf{r})$ w przestrzeni położeniowej. Techniczną trudnością przy rozwiązywaniu równań nadprzewodzącej teorii funkcjonału gęstości (SCDFT) jest olbrzymi rozrzut skal energetycznych charakteryzujących przerwę energetyczną (rzędu meV) z typowymi energiami elektronów i fononów (od ułamka do kilku eV). W praktyce stosuje się więc uproszczony schemat wyznaczenia współczynników u, v . Istota tego przybliżonego podejścia nie została jednak przez Doktoranta w pełni klarownie przedstawiona, zaś finalne wyrażenia (4.76) i (4.77) są niekonsystentne [lewa strona obu równań zależy od indeksu kwazicząstkowego i natomiast prawa strona jest wyrażona przez $n\mathbf{k}$]. Innym edytorskim niedociągnięciem rozdziału czwartego jest brak precyzyjnego powiązania efektywnego potencjału (4.22) wyprowadzonego kanoniczną transformacją Fröhlicha z potencjałem $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ hamiltonianu BCS podanego we wzorze (4.4) lub (4.5) [przypuszczalnie $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ należy traktować jako \mathbf{k}]. Chciałbym prosić Doktoranta o doprecyzowanie obu tych punktów podczas publicznej obrony rozprawy. Chciałbym też dowiedzieć się czy uśrednianie statystyczne z operatorem macierzy gęstości zdefiniowanym we wzorze (4.65) było faktycznie przeprowadzane względem pełnego hamiltonianu \hat{H} czy raczej jego wersji przybliżonej, na co wskazywałby dolny indeks ρ_0 .

Oryginalne wyniki obliczeń DFT uzyskanych dla kilku wybranych materiałów są opisane w części II (rozdziały 5-8). Pierwszy z tego fragmentu pracy jest poświęcony nadprzewodzącym właściwościom MgPd_2Sb i LiGa_2Ir , należących do rodziny faz Heuslera. Doktorant szczegółowo opisał aktualny zestaw danych doświadczalnych uzyskanych w kooperacji z grupą profesora Klimczuka z Politechniki Gdańskiej. Oba związki są nadprzewodnikami drugiego rodzaju z przejściem w temperaturach krytycznych odpowiednio 2,1 K oraz 2,94 K. Przy pomocy pakietu Quantum Espresso przeprowadzono analizę widma energetycznego elektronów i fononów oraz zbadano charakterystykę sprzężenia elektronowo-fononowego i wpływ ciśnienia hydrostatycznego. Relacje dyspersyjne związku MgPd_2Sb przedstawione na rysunku 5.5 wskazały na obecność dwóch płatów powierzchni Fermiego o skomplikowanej trójwymiarowej topologii. Wkład poszczególnych atomów i orbitali do lokalnej gęstości stanów elektronowych zilustrowano na rysunku 5.7. Informacja o gęstości stanów na powierzchni Fermiego pozwoliła wyznaczyć stałą sprzężenia elektron-fonon $\lambda_\gamma = 0,53$ konsystentną z empirycznym oszacowaniem na bazie formuły McMillana. W przypadku LiGa_2Ir elektronowe widmo elektronowe charakteryzuje się natomiast trzema powierzchniami Fermiego (jednym zamkniętym wokół punktu Γ oraz dwoma otwartymi). Rola oddziaływania spinowo-orbitalnego nie wykazała istotnych zmian widma elektronowego. W podrozdziale 5.4 Doktorant przedstawił fononowe relacje dys-

persyjne. Niskoenergetyczne akustyczne mody fononowe związku MgPd_2Sb pochodzą od atomów Pd (co jest dość intrygującym faktem), zaś kolejne gałęzie modów o słabej dyspersji wnoszą atomy Sb i Mg. Na podkreślenie zasługuje inwersja modów, biorąc pod uwagę kryterium mas poszczególnych atomów. Fononowe widmo LiGa_2Ir składa się również z trzech rozdzielnych modów, gdzie akustyczna gałąź pochodzi od atomów Ir, zaś kolejne od atomów Ga i odpowiednio Li. Uwzględnienie oddziaływania spinowo-orbitalnego nieznacznie wpływa tylko na mody pochodzące od atomów Gd. Doktorant przedstawił funkcję Eliashberga, wyznaczając stałą sprzężenia elektron-fonon z określeniem procentowego wkładu poszczególnych modów. Liczbowe wartości uśrednionych częstości fononowych i słabego sprzężenia elektron-fonon dla badanych związków zestawiono w tabeli 5.3. Ostatnia część rozdziału piątego dotyczy wpływu ciśnienia hydrostatycznego. Główne konsekwencje przyłożonego ciśnienia są odczuwalne poprzez usztywnienie modów fononowych, co osłabia wartość sprzężenia elektron-fonon (o kilka procent przy ciśnieniu 1 GPa). W rezultacie temperatury krytyczne badanych związków ulegają zmniejszeniu z liniowym czynnikiem $\Delta T_c/p = -0,23 \text{ GPa/K}$ dla MgPd_2Sb oraz $-0,05 \text{ GPa/K}$ odpowiednio dla LiGa_2Ir w znakomitej zgodności z obserwacjami doświadczalnymi.

Rozdział 6 dotyczy fononowego nadprzewodnictwa trzech związków z rodziny faz Heuslera o wzorze stechiometrycznym LiPd_2X , gdzie $\text{X}=(\text{Si,Ge,Sn})$. Wykazują one nadprzewodnictwo I-ego rodzaju, co jest rzadkością w układach niejednoskładnikowych. Temperatury krytyczne tych materiałów wynoszą 1,96 K (LiPd_2Ge) i 1,68 K (LiPd_2Si oraz LiPd_2Sn), wskazując na niewielką wartość sprzężenia elektron-fonon wynoszącą około 0,5. Doktorant przedstawił przegląd doświadczalnych pomiarów temperaturowej zależności oporu stałoprądowego, podatności magnetycznej i ciepła właściwego uzyskanych przez grupę profesora Klimczuka. Zasadnicze obliczenia struktury elektronowej i fononowej zostały przeprowadzone przez Doktoranta przy użyciu pakietu Quantum Espresso oraz częściowo także metodą LAPW dostępną w pakiecie WIEN2K. Wyznaczone elektronowe relacje dyspersyjne (rysunek 6.4) wskazały na wkład trzech pasm do niskoenergetycznego widma ze skomplikowaną topografią powierzchni Fermiego (rysunek 6.5). Elektronowa gęstość stanów badanych związków (rysunek 6.6) wykazała szereg wspólnych cech, zwłaszcza w bliskim sąsiedztwie energii Fermiego. Najbardziej intrygujące cechy stwierdzono natomiast w sektorze fononowym. W akustycznej gałęzi związków LiPd_2Ge oraz LiPd_2Sn zauważono anomalię fononową, przejawiającą się w kierunku $\Gamma - K$ przestrzeni Brillouina przez ujemne częstości. Kompletny zestaw modów fononowych badanych związków przedstawiono na rysunku 6.7. W przypadku LiPd_2Si możliwe było standardowe wyznaczenie funkcji Eliashberga oraz oszacowanie stałej sprzężenia elektron-fonon ($\lambda = 0,41$). Poprzez wzór Allena-Dynesa implikuje to temperaturę krytyczną 0,76 K, która niedoszacowuje empiryczną wartość $T_c=1,32 \text{ K}$. W przypadku związków LiPd_2Ge i LiPd_2Sn obecność anomalii fononowej wymusiła konieczność zastosowania pomocniczej metody określenia funkcji Eliashberga. Doktorant określił w tym celu parcjalne funkcje modów akustycz-

nych nadprzewodnika krzemowego i dokonał następnie ekstrapolacji do nadprzewodników LiPd_2Ge , LiPd_2Sn (rysunek 6.12). Wyznaczone w ten sposób sprzężenie elektron-fonon wskazało na wartość temperatury krytycznej zaniżonej o około 0,5 K. W końcowym fragmencie rozdziału rozpatrzono kilka potencjalnych źródeł anomalii fononowej. Doktorant zbadał stabilność relacji dyspersyjnych układu elektronowego i fononowego na ciśnieniu hydrostatyczne, określił wpływ zagnieżdżenia powierzchni Fermiego (w analogii do anomalii Kohna), uwzględnił rolę konfiguracji potencjału krystalicznego z podwójnym minimum, zbadał ewentualność dystorsji tetragonalnej i konsekwencje modulowanej amplitudy drgań. Po analizie, wszystkie z wymienionych czynników zostały jednak wykluczone. Za najbardziej prawdopodobną przyczynę anomalii fononowej Doktorant uznał efekty anharmoniczne. Rozdział szósty jest bogaty tematycznie i został przedstawiony klarownym językiem. Mam tylko pewną uwagę krytyczną do stosowanej terminologii. W odniesieniu do zakresu ujemnych częstości fononowych Doktorant używał określenia *urojonych częstości*. Jest to nieprecyzyjne stwierdzenie, gdyż zarówno dodatni jak i ujemny zakres wartości ω odpowiada liczbom rzeczywistym. Rolę składowej urojonej można oczywiście brać pod uwagę w sytuacji $\omega = \text{Re}(\omega) + i\text{Im}(\omega)$, gdzie wyraz urojony odpowiadałby tłumieniu drgań. Ten efekt jest (jak przypuszczam) uwzględniony w obecnej pracy, co zilustrowano poprzez poszerzenie linii fononowych również dla anomalnego modu miękkiego (rysunek 6.10). Chciałbym prosić Doktoranta o krótki komentarz w tej sprawie.

Rozdział siódmy podejmuje problematykę oddziaływania elektron-fonon związku ScAu_2Al o strukturze pełnego Heuslera, który przechodzi do stanu nadprzewodzącego w temperaturze krytycznej 5,12 K. Doktorant przeprowadził wnikliwą analizę danych doświadczalnych opisanych w referencjach [125,160] w celu rozstrzygnięcia pewnych rozbieżności, zarówno dotyczących wartości T_c jak też wielkości stałej sprzężenia elektron-fonon. W tym celu zastosował obliczenia przy pomocy pakietu Quantum Espresso, wykorzystując pakiet Superconducting-Toolkit w ramach podejścia funkcjonału gęstości do nadprzewodnictwa. Obliczenia struktury elektronowej wskazały na obecność dwóch powierzchni Fermiego o charakterze dziurowym [75 procent udziału w gęstości stanów $\rho(\epsilon_F)$] i elektronowym. Bez uwzględnienia oddziaływań spin-orbita energia Fermiego jest położona blisko osobliwości van Hove'a. Spinowo-orbitalne oddziaływanie nieco rozmywa tę osobliwość i ma dość istotne znaczenia dla widma elektronowego. Podobna sytuacja ma miejsce ze strukturą fononową, zwłaszcza w zakresie modów akustycznych. Oddziaływanie spin-orbita powoduje zmiękczenie modów w kierunku Γ -X przestrzeni Brillouina, co przekłada się na efektywność sprzężenia elektron-fonon odpowiedzialnego za nadprzewodnictwo. Główny wkład do izotropowej funkcji Eliashberga pochodzi od akustycznych modów atomów złota, dając w rezultacie wartość silnego sprzężenia elektron-fonon $\lambda = 0,97$ (bez uwzględnienia SOC) i $\lambda = 1,25$ (z uwzględnieniem SOC). Wynik ten bardzo znacząco odbiega od wcześniejszych przewidywań [125] na bazie wzoru McMillana. Doktorant przeprowadził również obliczenia przy pomocy teorii funkcjonału gęstości uogólnionego na stan nadprze-

wodzący, który w samodzielnym sposób uwzględnia wpływ deparujących oddziaływań kulombowskich i bezpośrednio wyznacza temperaturę krytyczną. W ramach takiego podejścia stwierdzono a) dwupasmowy mechanizm parowania z parametrami porządku typu $fali-s$, b) dużą wartość ilorazu $2\Delta/(k_B T_c) \in \langle 4, 5 \rangle$ oraz c) wartość sprzężenia elektron-fonon w zakresie od 0,7 do 2. Uwzględniono także wpływ fluktuacji spinowych i wyznaczono temperaturę przejścia zbliżoną do obserwowanej doświadczalnie wartości 5,12 K. Wyniki uzyskane przez Doktoranta znacząco doprecyzowały aktualną wiedzę o nadprzewodnictwie związku $ScAu_2Al$ z rodziny faz Heuslera, wykazując silne sprzężenie oddziaływań elektronowo-fononowych i dwupasmowy charakter parowania. Nasuwa mi się w tym kontekście następujące pytanie: czy obecność dziurowej i elektronowej powierzchni Fermiego przekłada się egzotyczną mieszaninę par dziurowych współistniejących z parami elektronowymi? Jeśli tak, to jakie doświadczalne metody mogłyby rozróżnić odmienny charakter par w różnych pasmach?

Rozdział ósmy dotyczy nadprzewodnictwa półprzewodnika $PbTe$ domieszkowanego talem i półprzewodnika $SnTe$ domieszkowanego indem. Wprowadzanie domieszek indukuje w nich wąski (*rezonansowy*) stan elektronowy w pobliżu krawędzi pasma walencyjnego i jednocześnie silnie wzmacnia właściwości termoelektryczne. Nadprzewodnictwo pojawia się w temperaturze krytycznej, której wartość silnie zależy od koncentracji domieszek. Doktorant postanowił zbadać wpływ domieszkowania na ewentualny fononowy mechanizm nadprzewodnictwa tych materiałów w konfrontacji z alternatywnymi scenariuszami rozpatrywanymi wcześniej w literaturze specjalistycznej (np. w ramach modelu Hubbarda z ujemnym potencjałem lokalnego oddziaływania elektronowego). Przedstawił najpierw ogólny zarys wpływu domieszki o dyskretnym poziomie energetycznym na widmo elektronów pasma przewodnictwa w oparciu o klasyczną pracę J. Friedela. Typowe widmo stanów elektronowych dla niewielkiej zawartości 0,1% atomów Tl w macierzystym $PbTe$ jest przedstawione na rysunku 8.3. Zasadnicza analiza dotyczyła wyznaczenia struktury elektronowej i fononowej domieszkowanych półprzewodników, ze zwróceniem uwagi na wpływ domieszek na efektywną wartość sprzężenia elektron-fonon. Obliczenia przeprowadzono przy użyciu różnych funkcjonałów wymiennie-korelacyjnych, obserwując rolę oddziaływania spinowo-orbitalnego. Szczegółowe wyniki dla $SnTe$ zestawiono na rysunkach 8.6 oraz 8.8, zaś dla $PbTe$ na rysunku 8.7. Wyznaczono również współczynnik Seebecka, który jest przedmiotem głównego zainteresowania badanych tutaj materiałów. W kontekście nadprzewodnictwa domieszkowanych związków korzystano z funkcjonału LDA oraz przybliżonego schematu wyznaczenia widma elektronowego i fononowego za pomocą metody KKR z przybliżeniem potencjału koherentnego. Na podstawie obliczeń numerycznych wykazano pojawienie się wąskiego stanu domieszki na krawędzi pasma walencyjnego (rysunek 8.15). Oszacowana wartość sprzężenia elektron-fonon okazała się być niewielką i wyniosła $\lambda \sim 0,1 - 0,2$ (zależnie od sposobu wyznaczania). W przeliczeniu na temperaturę krytyczną uzyskano duże niedoszacowanie empirycznej wartości. Doktorant

uwzględnił też wpływ dystorsji romboedrycznej na nadprzewodnictwo związku $\text{Sn}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$, ale nie stwierdzono diametralnego wzrostu sprzężenia elektron-fonon. Na podstawie obecnie uzyskanych wyników fononowy mechanizm parowania elektronowego wydaje się być raczej niełatwy do uzasadnienia. Doktorant wskazał pewne dodatkowe efekty fizyczne (np. anharmonizm i wpływ wakansji), które mogą ewentualnie wzmocnić wartość sprzężenia elektron-fonon.

Podsumowując zasadniczy fragment rozprawy doktorskiej (część II) stwierdzam, że mgr Gabriel Kuderowicz przeprowadził nietrywialną analizę widm układu elektronowego i fononowego oraz dokonał oszacowania wzajemnego oddziaływania elektronów z fononami na gruncie obliczeń *ab initio*. Obliczenia zostały przeprowadzone dla kilku wybranych materiałów z rodziny faz Heuslera oraz domieszkowanych półprzewodników PbTe i SnTe, które są aktualnie przedmiotem dużego zainteresowania, m.in. ze względu na właściwości topologiczne i/lub termoelektryczne. Doktorant wykazał się świetną znajomością danych doświadczalnych obu grup materiałów. Warto też podkreślić, że znaczna część wyników została uzyskana w kooperacji między grupą profesora B. Wiendlochy z Politechniką Gdańską. Mgr G. Kuderowicz zdobył cenną umiejętność posługiwania się wyrafinowanymi procedurami obliczeń numerycznych opracowanych w schemacie teorii funkcjonału gęstości. Dzięki przeprowadzonym obliczeniom uzyskano realistyczny obraz widma układu elektronowego badanych materiałów oraz informację na temat złożonej natury drgań sieci krystalicznej, m.in. ze wskazaniem obecności anomalii fononowych. Za najważniejsze osiągnięcie Doktoranta uznałbym wyznaczenie funkcji Eliashberga i oszacowanie wartości sprzężenia elektron-fonon z bezpośrednich obliczeń na gruncie teorii funkcjonału gęstości. Na tej podstawie obliczono temperaturę krytyczną przejścia układu do stanu nadprzewodzącego, a nawet wyznaczono przerwę energetyczną kwazicząstkowego widma sparowanych elektronów/dziur. Było to trudnym zadaniem, gdyż typowy zakres zmienności energii elektronów (\sim eV) różni się o trzy rzędy wielkości od energii przerwy energetycznej (\sim meV) fononowych nadprzewodników.

Dysertacja jest napisana dość starannie i układ pracy jest przejrzysty. Zauważyłem kilka potknięć edytorskich, więc z obowiązku recenzenta wymienię niektóre z nich. Doktorant stosował w swojej rozprawie anglojęzyczny sposób wyrażania ułamków dziesiętnych (przez kropkę zamiast przecinka), przypuszczalnie z powodu przyzwyczajenia w opracowywaniu kodów numerycznych oraz pisaniu artykułów przesyłanych do publikacji. Oprócz różnych literówek (które tutaj pominię) błędnie podano definicję masy efektywnej we wzorze (8.9) i definicję funkcji transportowej (C.5) [moim zdaniem, pod sumą względem i, \mathbf{k} nie powinno być pochodnej funkcji Diraca]. Z pozostałych niefortunnych wyrażenia wymienilibym: błędną wartość liczby Avogadro [str. 5], wyraz *nie zaburzony* powinien być pisany razem [str. 23], sformułowanie *Efektywna siła siłowa* jest niezbyt zgrabne [str. 90], fragment zdania *powierzchnia Fermiego przechodzi tutaj sama w siebie* jest niezrozumiały

[str. 92], stwierdzenie *komórka dąży do zapadania się od występującego ciśnienia -5.9 GPa* jest w sprzeczności z intuicją, ponieważ ujemne ciśnienie powinno raczej zwiększać niż zmniejszać objętość komórki [str. 114]. W ogólności są to mało istotne szczegóły, które nie wpływają na rozumienie zasadniczej treści rozprawy. Bardzo podoba mi się ostatni rozdział podsumowujący, gdzie zestawiono bogatą listę wniosków fizycznych. Przydatna jest także część III z dodatkami technicznymi.

Rozprawa doktorska magistra Gabriela Kuderowicza wnosi istotny wkład w zrozumienie indukowanego wymianą fononów mechanizmu parowania elektronowego wybranych związków z rodziny faz Heuslera i domieszkowanych półprzewodników na gruncie obliczeń z pierwszych zasad. Przedłożona rozprawa spełnia zwyczajowe i prawne wymagania określone w Ustawie *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz.U. z 2020 r. poz. 85 z późniejszymi zmianami) do nadania stopnia doktora w dyscyplinie *nauki fizyczne*. Na tej podstawie wnioskuję do Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Fizyczne Akademii Górniczo-Hutniczej im. St. Staszica w Krakowie o dopuszczenie magistra Gabriela Kuderowicza do publicznej obrony oraz dalszych etapów Jego przewodu doktorskiego. Uwzględniając również istotny wkład Doktoranta w przeprowadzeniu bardzo wyrafinowanych obliczeń dla superkomórek, oryginalną analizę dwupasmowego nadprzewodnictwa przy użyciu SCDFT oraz solidny dorobek publikacyjny (5 artykułów w *Phys. Rev. B*, 1 praca w *Scientific Reports* i 1 artykuł w *J. Magn. Magn. Matt.*) wnioskuję ponadto o wyróżnienie przedłożonej rozprawy.

Jacek Domański