

I N S T Y T U T F I Z Y K I T E O R E T Y C Z N E J  
U N I W E R S Y T E T W A R S Z A W S K I  
U L . P A S T E U R A 5, 0 2 - 0 9 3 W A R S Z A W A

---

prof. dr hab. Witold Bardyszewski  
Instytut Fizyki Teoretycznej  
Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski  
ul. Pasteura 5, 00-681 Warszawa

**Recenzja pracy doktorskiej mgr Nguyen Minh Nguyen**  
**pt.: " Topological and Non-Topological Boundary States in SnTe and HgTe**  
**Materials"**

Izolatory topologiczne niosą obietnicę przełomu w technologii urządzeń elektronicznych dzięki ich unikalnym własnościom związanymi z występowaniem powierzchniowych lub krawędziowych kanałów przewodnictwa balistycznego przy jednoczesnej blokadzie transportu elektronicznego w objętości. Istnienie niskowymiarowych stanów powierzchniowych jest wymuszone, lub jak to się obecnie nazywa „chronione” przez globalne własności topologiczne struktury pasmowej danego materiału. Topologia ma z kolei związek z globalną symetrią układu. Ta sytuacja motywuje badania nad zależnościami między tzw. niezmiennikami topologicznymi i balistycznym transportem kwantowym za pośrednictwem nietrywialnych stanów powierzchniowych. Podstawową kwestią jest stwierdzenie, czy nietrywialne własności topologiczne są warunkiem koniecznym i wystarczającym występowania „chronionych” stanów powierzchniowych oraz jakie niezmienniki topologiczne należy rozpatrywać jako krytyczne w tym względzie. Zagadnienia tego typu są osiłą recenzowanej pracy doktorskiej. W szczególności przedmiotem rozprawy są teoretyczne badania własności elektronicznych stanów brzegowych na przykładzie drutów kwantowych z SnTe oraz studni kwantowych HgTe/CdTe

Rozprawa powstała w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk pod opieką dr. hab. Wojciecha Brzezickiego i dr. Timo Hyarta i jest napisana w języku angielskim. Materiał wstępny liczący 17 stron ponumerowanych liczbami rzymskimi obejmuje podziękowania, abstrakt w języku polskim i angielskim, listę skrótów, spis treści oraz listę rysunków i tabel. Część zasadnicza zajmująca w sumie 94 strony składa się z sześciu rozdziałów oraz podsumowania i spisu literatury (101 pozycji). Ostatnie dwa rozdziały zawierają poprzedzone krótkimi wprowadzeniami przedruki dwóch wieloautorskich artykułów opublikowanych wspólnie z promotorami w Physical Review B w latach 2022 i 2023. W obu publikacjach mgr Nguyen Minh Nguyen jest pierwszym autorem, a dołączone oświadczenie precyzyjnie określają jego wkład w ich

powstanie. Struktura pracy wskazuje, że główne osiągnięcia są zawarte przede wszystkim w tych dwóch artykułach. Z punktu widzenia recenzenta rozprawa stanowi jednak nierozwalną całość i jako taka podlega ocenie.

Pierwsze cztery rozdziały wprowadzają elementy niezbędne do zrozumienia głównych tez zawartych w artykułach i w podsumowaniu. Są one dość krótkie i nie do końca spełniają swoją rolę, do czego odniosę się w podsumowaniu.

Rozdział 1 poświęcony jest omówieniu klasyfikacji izolatorów topologicznych opartej na występowaniu symetrii dyskretnej nie związanej ze strukturą krystaliczną, takich jak symetria odwrócenia czasu, symetria cząstka-dziura oraz symetria chiralna leżące u podstaw standardowego podziału na dziesięć podstawowych klas. Autor omawia reprezentatywne modele Qi-Wu-Zhanga oraz Bernevig-Hughesa-Zhanga. Prezentacja jest zilustrowana starannie wykonanymi diagramami fazowymi dla tych modeli w odpowiednio dobranym zakresie parametrów. W zasadzie rozprawa koncentruje się na układach nieoddziałujących elektronów lub ogólniej na układach opisanych przez hamiltoniany jednoelektronowe. W ramach rozszerzenia na układy oddziałujące w przybliżeniu średniego pola pojawia się omówienie modelu Kitaeva tzw. modów Majorany w obecności nadprzewodnictwa, zgodnie ze schematem Bogoliubova-De Gennes'a. Topologiczna charakterystyka nadprzewodników oparta na własnościach hamiltonianu Bogoliubova-De Gennes'a jest przekonująco zilustrowana odpowiednimi diagramami fazowymi i wykresami pasmowymi.

W kolejnym rozdziale dyskutowane są własności krystalicznych izolatorów topologicznych na przykładzie układów opartych na SnTe, które stanowią podstawę pierwszego z artykułów włączonych do rozprawy. Symetria krystaliczna, a w szczególności odbicie zwierciadlane może modyfikować klasyfikację topologiczną w zależności od wprowadzonych wcześniej elementów symetrii wprowadzając dodatkowe niezmienniki topologiczne, takie jak zwierciadlane liczny Cherna itp.. W ten sposób korespondencja między topologią pasm we wnętrzu i stanami na ścianach układu ulega modyfikacji. Na przykład okazuje się, że niezerowa przerwa energetyczna w paśmie stanów brzegowych niezgodnych z symetrią przestrzenną nie musi świadczyć o trywialnej topologii objętościowej struktury pasmowej. W ramach modelu ciasnego wiązania przedstawiono przykład przejścia topologicznego w grubej warstwie SnTe prostopadłej do kierunku (001). Przykład ten potwierdza korelację między wartością niezmiennika topologicznego i pojawieniem się parzystej liczby stożków Diraca na płaszczyźnie brzegowej symetrycznej względem płaszczyzny odbicia.

W dalszej części rozprawy (rozdział 3 pod tytułem „Gapless topological phases”) omówiono własności topologiczne powierzchni Fermiego w materiałach o zerowej przerwie i zadanych symetriach globalnych. Klasyfikacja topologiczna powierzchni Fermiego jest związana z ich stabilnością ze względu na zaburzenia i opiera się na znanej „dziesięciokrotnej” klasyfikacji

izolatorów topologicznych za względu na różne klasy symetrii poza-przestrzennych. Klasyfikacja ta może być przeprowadzona za pomocą niezmienników topologicznych lub przez konstrukcję minimalnych hamiltonianów, które w zależności od narzuconej symetrii dopuszczają lub nie dopuszczają zaburzeń prowadzących do otwarcia przerwy, pozwalając w ten sposób odróżnić przypadki topologicznie trywialne od nietrywialnych. To podejście jest zilustrowane za pomocą analizy dwóch standardowych hamiltonianów modelowych odnoszących się do półmetali Weyla i nadprzewodników nodalnych. W obu przypadkach wskazano odpowiednie niezmienniki topologiczne wykazując ich związek z domknięciem przerwy energetycznej w kryształach objętościowym. Wykazano też korelację pomiędzy wewnętrznymi punktami Fermiego i strukturą pasmową stanów powierzchniowych. W szczególności, wykazano w jaki sposób zaprezentowany model czteropasmowy ze złamaną symetrią odwrócenia czasu wiąże stożki Weyla we wnętrzu kryształu z formowaniem płaskich pasm stanów powierzchniowych. Występowanie topologicznie stabilnej powierzchni Fermiego w kryształach objętościowym może prowadzić do pojawienia się pasm o zerowej energii na powierzchni kryształu.

Króciutki rozdział czwarty omawia topologiczne fazy wyższego rzędu, charakteryzujące się występowaniem stanów w przerwie energetycznej zlokalizowanych na styku płaszczyzn brzegowych. Ich obecność jest wymuszona topologicznymi własnościami struktury pasmowej we wnętrzu materiału charakteryzującej się niezerową przerwą energetyczną. Przykładowo można rozpatrywać trójwymiarowe izolatory topologiczne, które nie posiadają zeroprzerwowych stanów na powierzchni, ale posiadają stany propagujące się wzdłuż krawędzi (stany „zawiasowe”) lub zlokalizowane przy wierzchołkach. Mogą one być chronione symetrią odwrócenia czasu i krystaliczną symetrią obrotu, albo przez odbicie zwierciadlane. Jako przykład omówiono modelowy hamiltonian zaproponowany w ref [48]. W tym modelu zidentyfikowano odpowiedzialny za przejście topologiczne topologiczny inwariant klasy  $Z_2$  jako pfaffian jednego bloku hamiltonianu w bazie stanów własnych operatora odbicia. Rachunki numeryczne potwierdzają korelację tego niezmiennika z występowaniem stanów „zawiasowych”.

Pierwszy z dwóch artykułów zawierających główne wyniki rozprawy zawiera się w rozdziale piątym i nosi tytuł „Corner states, hinge states and Majorana modes in SnTe nonowires”. Tellurek cyny jako sztandarowy przykład krystalicznego izolatora topologicznego ma bogatą literaturę. Na tym tle, badania własności topologicznych drutów kwantowych z tego materiału prezentują się ubogo. Podjęcie tej tematyki w artykule jest zatem jak najbardziej na czasie. Przedstawiono próbę znalezienia wzajemnych powiązań między symetrią układu, a jego własnościami topologicznymi reprezentowanymi przez niezmienniki topologiczne. W ramach modelu ciasnego wiązania zbadano możliwe mechanizmy wytwarzania różnych stanów topologicznych za pomocą łamania symetrii. Złamanie symetrii odwrócenia czasu poprzez

dodanie osiowego pola magnetycznego prowadzi m. in. do pojawienia się fazy typu jednowymiarowy półmetal Weyla chronionej przez symetrią obrotu wokół osi drutu oraz fazy izolatora z odwróconą strukturą pasmową. Rachunki numeryczne wskazują na pojawienie się stanów „zawiasowych” na krawędziach. Stany takie pojawiają także bez pola magnetycznego, co może wskazywać na istnienie topologicznych faz wyższego rzędu w SnTe. Zidentyfikowano niezmiennik topologiczny odpowiedzialny za występowanie topologicznie chronionych stanów wierzchołkowych. W konkluzji stwierdzono, że zlokalizowane powierzchniowe stany topologiczne i stany topologiczne wyższego rzędu mogą współistnieć w drutach kwantowych SnTe. Pojawiło się frapujące stwierdzenie, że metoda  $k \cdot p$ , w odróżnieniu do zastosowanej metody ciasnego wiązania, nie jest w stanie opisać tego układu. Nasuwa się pytanie dlaczego miałyby być inaczej? W części poświęconej badaniu modu Majorany w stanie nadprzewodzącym wykazano, że symetria inwersji podtrzymuje zero-przerwowany mod Majorany w całej objętości drutu, natomiast jej złamanie może spowodować zlokalizowanie modu zerowego na końcach drutu. Jest to ważna wskazówka dla eksperymentatorów.

Ostatni rozdział zawiera artykuł pod tytułem „Unprotected edge modes in quantum spin Hall insulator candidate materials”. Podjęto w nim próbę analizy heterostruktur HgTe/CdTe oraz HgS/CdTe. Mimo, że struktury te weszły dość dawno do kanonu materiałów topologicznych, dzięki zastosowaniu metody ciasnego wiązania udało się uzyskać nowe, zaskakujące wyniki. Okazuje się, że w topologicznie trywialnym stanie układu pojawiają się stany krawędziowe, które na przykład w przypadku HgS/CdTe mogą wchodzić w przerwę energetyczną i mieć wpływ na transport balistyczny badany eksperymentalnie. Stany te mogą być usunięte przez włączenie potencjału zaburzającego na końcach próbki, z zatem nie są one topologicznie chronione. Ważnym wynikiem tej pracy jest powiązanie występowania tych stanów z obecnością płaskiego pasma o zerowej energii w geometrii wstążki. Mechanizm ten został elegancko zilustrowany za pomocą minimalnego modelu ciasnego wiązania uwzględniającego jedynie wiązania typu sigma oraz zaniedbującego sprzężenie spin-orbita i powiązany z fazami Zaka dla płaskich pasm.

Przechodząc do oceny rozprawy należy przede wszystkim podkreślić, że tematyka w niej podjęta jest niezwykle złożona, ale też bardzo aktualna. Nie mniej wiedziony doświadczeniem z moich poprzednich recenzji, spodziewałem się, że część wstępna (rozdziały 1-4) będzie stanowić przyjemne wprowadzenie do części zasadniczej czyli do wspomnianych dwóch artykułów. Tymczasem spotkało mnie rozczarowanie. Ta część rozprawy jest napisana fatalnym językiem i stylem. Bardzo często w zdaniach brakuje podmiotu lub orzeczenia, a niektóre równoważniki (?) zdania mają charakter niezrozumiałej zbitki słownej. Jako przykład można tutaj przywołać ostatnie zdanie podrozdziału 1.2, czy też tekst wokół równania (2.5), albo zdanie „Thus, we open the Hamiltonian respect to  $n_z$ -direction to show the surface Dirac co-

nes” (str 29). Trudno też nie wspomnieć o licznych usterkach edytorskich na przykład trudno zrozumieć czego dotyczy równanie (3.3) i jak wiąże się z równaniem (3.2). Podobny problem ma miejsce w równaniu (4.1): w jaki sposób  $k_1$  i  $k_2$  wiążą się z  $k_x$  i  $k_y$ ? Z drugiej strony na pochwałę zasługują znakomicie wykonane wykresy.

Moja ocena zasadniczej części pracy zawartej w artykułach włączonych do rozprawy, zarówno co do formy jak i odnośnie ich wartości naukowej, jest z kolei bardzo wysoka. Jak już wspomniałem, istotnym osiągnięciem doktoranta przedstawionym w pierwszym artykule jest zwrócenie uwagi na możliwość wystąpienia stanów topologicznych wyższego rzędu w drutach kwantowych SnTe. Kolejnym ważnym wynikiem jest zbadanie mechanizmu lokalizacji topologicznie chronionych zerowych modów Majorany na końcach drutu i powiązanie tego efektu z łamaniem symetrii inwersji. Warto nadmienić, że artykuł ten opublikowany w zeszłym roku został już zacytowany 7 razy.

Najważniejszym osiągnięciem zawartym w drugim artykule jest wskazanie na istnienie nie-topologicznych stanów krawędziowych w heterostrukturach HgTe/CdTe or HgS/CdTe i wykazanie, że efekt ten nie może być opisany w oparciu o modelowe hamiltoniany typu  $k \cdot p$ . Od chwili opublikowania w styczniu tego roku artykuł ten był cytowany trzykrotnie.

W podsumowaniu stwierdzam, że mimo pewnych niedociągnięć językowych i edytorskich w pierwszej części, przedłożona rozprawa doktorska charakteryzuje się wysokim poziomem naukowym. Doktorant wykazał się dużą dojrzałością badawczą w tak złożonej dziedzinie jak fizyka izolatorów topologicznych.

W moim przekonaniu przedstawiona rozprawa spełnia wymagania zwyczajowe stawiane pracom doktorskim oraz wypełnia wymogi ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” (tekst jedn. Dz. U. z 2023 r. poz. 742) i wnioskuję o dopuszczenie mgr Nguyen Minh Nguyen’a do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Warszawa, 4 grudnia 2023 r.

  
prof. dr hab. Witold Bardyszewski