

Dr hab. Andrzej Łusakowski
prof. nzw. IF PAN
Instytut Fizyki PAN
Al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa

Recenzja pracy doktorskiej mgr Shiva Safaei “The properties of the topological crystalline insulator surface states – theoretical analysis”.

Recenzowana praca doktorska została wykonana w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Oddziale ON IV pod kierunkiem prof. dr hab. Ryszarda Buczki. Poświęcona jest ona teoretycznej analizie krystalicznych izolatorów topologicznych w półprzewodnikach grupy IV-VI.

Należy podkreślić, że tematyka izolatorów topologicznych stanowi jeden z bardzo szybko rozwijających się kierunków w fizyce ciała stałego w ciągu ostatnich lat, dlatego podjęcie tej tematyki przez mgr Shiwę Safaei uważam za głęboko uzasadnione.

Praca składa się z pięciu rozdziałów.

Rozdział 1 to krótki wstęp do tematyki izolatorów topologicznych. Podane są najważniejsze osiągnięcia, uznawane jako kluczowe dla rozwoju tego działu fizyki i sformułowany jest zasadniczy cel badań doktorantki. Przedstawiony jest również plan dalszej części pracy doktorskiej.

Rozdział 2 to bardzo obszerne rozwinięcie tematyki poruszanej w rozdziale pierwszym. Omówiony jest kwantowy efekt Halla, faza Berry’ego, niezmiennik TKNN. Następnie Autorka przechodzi do przedstawienia bardziej istotnych z punktu widzenia pracy zagadnień, a mianowicie kwantowego spinowego efektu Halla, symetrii odwrócenia czasu, niezmiennika Z_2 . a w końcu omawia koncepcję krystalicznych izolatorów topologicznych. Chociaż rozdział ten nie zawiera własnych wyników Autorki, uważam ten rozdział za cenny, ponieważ stanowi bardzo dobre wprowadzenie do teorii izolatorów topologicznych. Rozdział 2 oczywiście nie jest kompletnym podręcznikiem izolatorów topologicznych, szereg punktów potraktowanych jest skrótowo, nie zawsze wszystkie wzory są wystarczająco dokładnie opisane, ale rozdział zawiera rozwinięty zbiór odnośników literaturowych i może być z całą pewnością polecony jako krótki przewodnik po tym temacie.

W tej części pracy znalazłem drobny błąd edytorski - we wzorach 2.63 i 2.77 brakuje znaku minus.

Wszystkie obliczenia przedstawione w pracy zostały wykonane przy pomocy metody ciasnego wiązania lub metody funkcjonału gęstości. Dlatego w rozdziale 3 zostały krótko omówione te dwa podejścia obliczeniowe. To czego mi brakuje w tym rozdziale to krótkiego opisu metody rozwiązywania hamiltonianów ciasnego wiązania dla układów ograniczonych w jednym kierunku. Z dalszej części pracy wynika, że obliczenia były prowadzone metodą funkcji Greena, która to metoda jest daleko mniej znana niż samo przybliżenie ciasnego wiązania, tak więc oczekiwałbym co najmniej krótkiego opisu stosowanego algorytmu. Tym bardziej, że w następnym

rozdziale pojawia się szereg rysunków, na których przedstawiana jest funkcja spektralna, w ogóle w pracy niezdefiniowana, a wiążąca się z metodą funkcji Greena. Drugim istotnym brakiem tego rozdziału jest brak dyskusji używanych pseudopotencjałów i możliwości ich zastosowania dla związków IV-VI. Wiadomo na przykład, że bezpośrednio przybliżenie LDA, o którym Autorka pisze pod koniec Rozdziału 3, zastosowane do PbTe daje w wyniku błędną, ujemną przerwę. Problem zaniżonej lub wręcz ujemnej przerwy jest szczególnie istotny przy obliczeniach dotyczących izolatorów topologicznych.

Rozdział 4 to zasadnicza część pracy składająca się z czterech części.

Część pierwsza poświęcona jest analizie trójwymiarowych kryształów mieszanych $Pb_{1-x}Sn_xTe$. Po krótkim omówieniu struktury pasmowej PbTe i SnTe Autorka bada stany powierzchniowe dla trzech płaszczyzn krystalograficznych: (001), (110) i (111). Na szeregu rysunków przedstawione są zależności dyspersyjne dla różnych zawartości cyny w $Pb_{1-x}Sn_xTe$. Zostały policzone i przedstawione na rysunkach zależności wartości i kierunków polaryzacji spinowej dla stanów powierzchniowych od energii.

Do tej części pracy mam następujące uwagi.

Na stronie 40 Autorka pisze, że przerwa w SnTe jest w punkcie L strefy Brillouina, podczas gdy rysunek 4.2a wskazuje, że przerwa znajduje się na linii $L-1'$.

Dwa paragrafy na stronie 42 nie są wystarczająco jasno napisane. W pierwszym Autorka umieszcza zdanie mówiące, że ani SnTe ani PbTe nie są izolatorami topologicznymi, ponieważ inwersja pasm następuje w parzystej liczbie punktów strefy Brillouina. Jeżeli przyjąć ogólną definicję, w myśl której izolatorem topologicznym jest układ posiadający odpowiednie stany powierzchniowe, to przedstawione dalej wyniki dla SnTe przeczą temu stwierdzeniu, ponieważ dla tego związku obserwowane są stany powierzchniowe o energiach w objętościowej przerwie energetycznej (rys. 4.6d). Prawdopodobnie Autorce chodziło o podkreślenie różnicy pomiędzy krystalicznymi izolatorami topologicznymi, w których istotną rolę odgrywają symetrie krystaliczne a izolatorami topologicznymi, w których zasadniczą rolę odgrywa symetria odwrócenia czasu. Drugi paragraf zawiera sformułowanie "non-time-reversal invariant class of materials" sugerujące, że SnTe należy do takiej klasy, co nie jest prawdą.

Nie jest również wyjaśnione co Autorka rozumie przez oddziaływanie pomiędzy punktami L strefy Brillouina skutkujące w przesunięciu punktu Diraca stanów powierzchniowych w kierunku punktu $\bar{\Gamma}$ zrzutowanej (dwuwymiarowej) strefy Brillouina.

Wyniki zostały opublikowane w pracy S. Safaei *et al*, Phys. Rev. B **88**, 045305 (2013).

Druga część rozdziału 4 zawiera wyniki analogiczne jak część pierwsza, tym razem jednak dla innego kryształu mieszanego z grupy IV-VI $Pb_{1-x}Sn_xSe$. Ponieważ SnSe nie występuje w przyrodzie w fazie kubicznej, w szczególności nie były znane parametry konieczne do obliczeń w przybliżeniu ciasnego wiązania duży nacisk został położony na opis metody otrzymania tych parametrów dla kubicznej postaci SnSe. Przejście izolator – izolator topologiczny w $Pb_{1-x}Sn_xSe$ opisane zostało w funkcji temperatury poprzez założenie odpowiednich zmian w parametrach ciasnego wiązania. Stanowi to bezpośrednie nawiązanie do eksperymentu, gdzie przejście do fazy

izolatora topologicznego kryształu $Pb_{1-x}Sn_xSe$ było obserwowane przy zmianie temperatury. W dalszej części następuje analiza podobna do tej zawartej w części pierwszej.

Nie mam uwag krytycznych do tej części pracy.

Wyniki zostały opublikowane w pracach B. M. Wojek, R. Buczko, S. Safaei, *et al* Phys. Rev. B **87**, 115106 (2013) oraz C. M. Polley *et al*, Phys. Rev. B **89**, 075317 (2014).

Trzecia część rozdziału 4 poświęcona jest fizyce izolatorów topologicznych w cienkich warstwach SnTe oraz SnSe. Zbadana została zależność przerwy energetycznej takich układów w funkcji liczby warstw monoatomowych, porównane zostały wyniki dla warstw o nieparzystej i parzystej liczbie warstw monoatomowych. Określone zostały zależności dyspersyjne stanów krawędziowych.

Nie mam uwag merytorycznych do tej części pracy, mój jedyny zarzut dotyczy braku zdefiniowania używanych pojęć. Nie jest opisana metoda rekurencyjnej funkcji Greena, nie jest zdefiniowana funkcja spektralna, nie wiadomo co w danym kontekście oznacza gęstość stanów a także rzuty na stany krawędziowe. Dotyczy to ostatniego paragrafu na stronie 75. W całej pracy nie znalazłem nawet odnośników literaturowych, z których można by się dowiedzieć w jaki sposób zostały przeprowadzone obliczenia.

Ta część rozprawy doktorskiej została opublikowana w pracy S. Safaei, *et al*, New J. Phys. **17**, 063041 (2015).

Ostatnia część rozdziału 4 to badanie wpływu naprężeń w cienkich warstwach SnSe na możliwość obserwacji kwantowego spinowego efektu Halla. Nie mam uwag krytycznych do tej części pracy.

Rozdział 5 to krótkie podsumowanie najważniejszych wyników pracy.

Należy podkreślić bardzo dobre przygotowanie pracy pod względem graficznym i edytorskim. Przejrzyste rysunki są bardzo dobrze opisane. Spis literatury obejmuje, moim zdaniem, większość najważniejszych dla omawianej tematyki pozycji. Widać bardzo duży wkład pracy w przygotowanie rozprawy.

Przystawione powyżej pewne krytyczne uwagi w bardzo niewielkim stopniu wpływają na ostateczną ocenę pracy. Uważam, że recenzowana praca spełnia wszystkie warunki stawiane pracom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie mgr Shivy Safaei do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Wnioskuję również o wyróżnienie pracy. Prawie wszystkie wyniki otrzymane przez Autorkę zostały już opublikowane w wysoko ocenianych czasopismach. Rezultaty części trzeciej rozdziału 4 stanowią istotny wkład w fizykę izolatorów topologicznych. Należy również podkreślić próby powiązania teoretycznych obliczeń z realnie przeprowadzonymi eksperymentami, co jak wiadomo, zwykle jest bardzo trudnym zadaniem.

Dr hab. Andrzej Łusakowski, prof. nzw. IFPAN

