

Kraków, 24 kwietnia 2023

Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr Rajibul Islam

**pt.: „Topological phases of 3D superlattices
and 2D materials: theoretical modelling”**

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska pana mgr. Rajibul Islam, pt. „Fazy topologiczne 3D supersieci oraz materiałów 2D: modelowanie teoretyczne” (tytuł oryginalny w języku angielskim: „Topological phases of 3D superlattices and 2D materials: theoretical modelling”), została przygotowana w ramach studiów doktoranckich w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie, pod kierunkiem promotora dr hab. Carmine Autieri, prof. IF PAN.

Dysertacja, opracowana w języku angielskim, ma charakter teoretyczny i stanowi pracę pisemną będącą zbiorem opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych (zgodnie z Art. 187.3 Ustawy „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce”). Praca liczy łącznie 75 stron (wliczając trzy publikacje doktoranta), podzielona jest na 4 rozdziały, poprzedzone: *Abstraktem* (w języku polskim i angielskim), *Dedykacjami i podziękowaniami*, *Deklaracją autora*, *Listą publikacji* (wchodzących w skład rozprawy oraz wykraczających poza jej zakres), oraz *Listą rysunków*. Ostatni nienumerowany rozdział, tj. *Bibliografia*, zawiera 118 pozycji literaturowych. **Właściwa część rozprawy** (4 rozdziały wspomniane wcześniej) podzielona jest na *Wstęp*, opis *Metodologii*, rozdział dotyczący *Wybranych artykułów składających się na rozprawę wraz z podsumowaniem* (do którego dołączone są 3 artykuły naukowe), oraz rozdział *Perspektywy*.

Uwagi dot. treści rozprawy.

Rozdział pierwszy *Wstęp*, opisuje zagadnienie „parametru porządku” w teorii Landaua oraz ograniczenie w jego stosowalności w kontekście kwantowego efektu Halla. Na tej bazie, autor uzasadnia potrzebę wprowadzenia nielokalnych parametrów porządków (inwariantów topologicznych). W rozdziale tym pojawia się podział materiałów topologicznych (ze względu na łamanie symetrii odwrócenia w czasie, tj. *time reversal symmetry*, oraz istnienie szczeliny energetycznej – rys. 1.1) – podział ten jednak powinien być bardziej omówiony w tekście głównym rozdziału, a znaczenie skrótów powtórzone w opisie rysunku. Następnie autor, opisuje teoretyczne aspekty faz topologicznych w układach zachowujących symetrię odwrócenia w czasie (sekcja 1.1). Co ciekawe, skrót TR (czyli *time reversal*) nie jest wyjaśniony w tekście (choć pojawia się na rys. 1.1 czy w tytule



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptak,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

sekcji 1.1). W akapicie poprzedzającym sekcja 1.1, zamiennie wykorzystane jest oznaczenie TRS: ... *in TRS preserved and TRS broken symmetry*. W drugim przypadku *symmetry* jest zbędne, ponieważ występuje już w skrócie TRS (tj. time reversal symmetry). Podobny problem dotyczy skrótu TKNN (pierwsze zdanie 2 strony) – choć w tym przypadku można domyśleć się znaczenia z kontekstu zdania, że jest to skrót od nazwisk *Thouless-Kohmoto-Nightingale-Nijs*.

Cześć opisująca układy łamiące symetrie odwrócenia w czasie, pojawia się jako podrozdział 1.1.2, zawierający opis np. układów antyferromagnetycznych – ten fragment powinien być wydzielone w tej sekcji. Rys. 1.2 wykorzystany jest do opisuj inwersji pasm w układach HgTe oraz CdTe (inwersja stanów Γ_6 i Γ_8) – jest to przykład dosyć nieintuicyjny (brak prostego wyjaśnienia znaczenia tych stanów w kontekście orbitali atomowych). Dodatkowo pojawia się parę problemów edycyjnych, np. *ladnau* powinno być *Landau*, brak spacji w niektórych miejscach (permanently pomiędzy tekstem a referencjami, *Dirac semimetal(DSM)* czy *Weyl semimetal(WSM)* podsekcja 1.1.2).

Wstęp może być trudny w odbiorze przez czytelnika nie zaznajomionego z omawianą tematyką. Pojawia się tu wiele pojęć, które wyjaśnione są skąpo lub wcale. Choć rozprawa dotyczy obliczeń *ab initio* (DFT), teoretyczne relacje podane we wstępie nie wyjaśniają jak dane wielkości (np. indeksy topologiczne) mogą być wyznaczone numerycznie (brak np. dodatków, które opisywałyby ten aspekt). Ze względów dydaktycznych, wstęp powinien być znacznie bardziej rozbudowany i dotyczyć ogólnie rozumianych układów topologicznych – głównie wyników eksperymentalnych (których nie brakowało we wstępach do artykułów naukowych doktoranta) przybliżających tematykę topologicznych materiałów w kontekście praktycznej realizacji.

Rozdział 1 kończy się tytułem sekcji 1.2 *The main theme and content of the thesis*, której treść została usunięta względem poprzedniej wersji doktoratu. Oznacza to, że w aktualnej wersji **brak sekcji kończącej rozdział oraz definiującej cel doktoratu**. Dodatkowo, **rozdział ten zawiera 7 figur, przy czym brak informacji nt. ich pochodzenia** – tj. odnośników literaturowych.

Rozdział drugi Metodologia: w rozdziale tym przedstawione są podstawowe informacje dot. wykorzystywanych technik (np. opis dot. układu wielu elektronów jako uzasadnienie teorii funkcjonału gęstości, eng. *density functional theory* (DFT), opis samej techniki DFT, funkcjonałów korelacyjno-wymiennych (m.in. pojęć LDA, GGA, PAW), oraz modeli ciasnego wiązania w bazie orbitali Wanniera). W pierwszym paragrafie podana jest informacja dot. wykorzystywanego oprogramowania (tj. *VASP*, *wannier90*, oraz *wanniertools*).

O ile sekcje 2.1 oraz 2.2 dotyczą typowych obliczeń, to sekcje 2.3 (pt. *Wannier based tight-binding model*), jest szczególnie istotna ze względu na wyniki numeryczne prezentowane w publikacjach autora. Wydaje mi się, że opis schematu 2.1 jest w ogólności



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptak,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

błędny i powinien być znacznie bardziej rozszerzony – prezentuje on raczej strategię znajdowania modeli ciasnego wiązania w bazie Wanniera badanych materiałów, a to dopiero pierwszy krok do „przewidywania nowych topologicznych materiałów” (jak głosi podpis rysunku). Schematycznie prezentowane podejście jest ogólnie stosowana, również po za badaniami układów topologicznych (warto wspomnieć chociażby o jej sukcesach w licznych badaniach teoretycznych nadprzewodników na bazie żelaza).

Sekcja 2.3 jest opisana bardzo skąpo, choć dotyczy głównej techniki wykorzystanej w badaniach autora i prezentowanych w publikacjach wchodzących w skład rozprawy. Pojawia się sformułowanie „This reduce the size of the matrix.” – bez wyjaśnienia o jaką macierz chodzi (ostatnie zdanie pierwszego paragrafu sekcji 2.3). Wzór 2.29 jest błędnie podany – indeks n opisujący funkcje falowe (stany Blocha), nie może równocześnie numerować stanów Wanniera W_{nR} . W równaniu 2.30, pojawia się błąd w indeksach stanów Wanniera (podobnie w równaniu 2.31). Oczekuję, że w trakcie ewentualnej obrony zaprezentowane zostaną prawidłowe relacje.

W sekcji 2.3 pojawia się rozróżnienie pomiędzy zapisem H uwzględniających jedynie położenie komórek prymitywnych (wzór 2.32) oraz dokładanych położenia orbitali Wannier (wzór 2.33). Ten paragraf kończy zdanie: *The formalism in Eq. 2.33 is more accurate in the context of topological materials due its relations with Berry phase and Berry curvature*, niemniej ten kontekst nie jest podany. Proszę o jego podanie i wyjaśnienie dlaczego 2.33 jest bardziej właściwa w tym kontekście. Warto wspomnieć że *wanniertools* wykorzystuje oba sformułowania (w zależności od zdefiniowania `WANNIER_CENTERS` w plikach wejściowych programu *wanniertools*). W kolejnym paragrafie, podane są relacje dot. fazy Berrego. Prezentowane są one jednak dla systemu 1D, nie uwzględniając formalizmu prezentowanego w tej sekcji – podczas ewentualnej obrony proszę zaprezentować dokładne relacje pozwalające określić fazę Berrego, z wykorzystaniem Hamiltonianu w bazie orbitali Wanniera.

W sekcji 2.3 jest brak informacji nt. metody zastosowanej do obliczeń stanów powierzchniowych. Jest to o tyle dziwne, że w praktyce wszystkie prezentowane w rozprawie wyniki, dotyczą głównie badań korzystających z tej metody (i zaimplementowanej w *wanniertools*). Metoda ta powinna być dokładnie przedstawiona i omówiona.

Podsumowując, sekcja 2.3 dotyczy techniki wykorzystanej praktycznie w każdej pracy autora – jednak przedstawiony opis jest bardzo pobieżny, w kontekście dydaktycznym praktycznie nie przedstawia żadnej wartości. Dla przykładu, brak dokładnego opisu strategii zastosowanej do znajdowania maksymalnie zlokalizowanych stanów Wanniera (w ramach *wannier90*) na podstawie stanów Blocha (w ramach VASP/DFT). Powstają wątpliwości, czy doktorant rozumie zastosowane metody bazujące na modelach ciasnego wiązania uzyskanych z dokładnych obliczeń DFT.



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

Treść główna

Rozdział trzeci stanowi zbiór trzech prac autora, wchodzących w skład doktoratu. Podzielony jest on na trzy sekcje dot. każdej z prac. Sekcja 3.2 dotyczy poszukiwań płaskich pasm w układach 3D opartych na supersieciach HgTe/CdTe oraz HgTe/HgSe (praca Phys. Rev. Research 4, 023114 (2022)). Sekcja 3.3 omawia spinową zależność struktury elektronowej ultracienkiej 2D warstwy MSi_2N_4 , – dokładnej monowarstwy oraz dwuwarstwy (Phys. Rev. B 104, L201112 (2021)). Sekcja 3.4 prezentuje wyniki przewidujące istnienie fazy $1\text{T}'$ związków MSi_2Z_4 , gdzie $\text{M}=\text{Mo}, \text{W}$ oraz $\text{Z}=\text{P}, \text{As}$ (Phys. Rev. B 06, 145149 (2022)). Pomimo tytułu rozdziału, brakuje osobnej sekcji podsumowującej zebrane wyniki – zatem w połączeniu z brakiem „celu rozprawy”, ciężko stwierdzić czy założony cel został osiągnięty.

W żadnej z prac, nie znalazłem porównania struktur pasmowych otrzymanych z dokładnych obliczeń DFT ze strukturami pasmowymi otrzymanymi z modeli ciasnego wiązania w bazie orbitali Wanniera. Nie ma zatem pewności, że otrzymane modele w sposób prawidłowy odtwarzają strukturę pasmowa. Podczas ewentualnej obrony proszę o przedstawienie takich porównań dla związków badanych w prezentowanych pracach.

(Seksja 3.3) W pracy Phys. Rev. B 104, L201112 (2021) na rys. 1 prezentowane są relacje dyspersyjne dla fononów realizowanych w jednej i dwóch monowarstwach oraz z kryształ 2H-MoSi₂N₄ – w przypadku panelu (c), tj. wynik dla kryształu, brak wyjaśnienia dla płaskich pasm o prawie zerowej częstotliwości. (Podobny wynik dotyczący MoSi₂As₄ prezentowany jest na Fig. 5). Czy oznacza to, że układ ten jest na granicy stabilności?

(Seksja 3.4) W pracy Phys. Rev. B 106, 245149 (2022) prezentowana jest również relacja dyspersyjna fononów dla MoSi₂P₄ – wg. Sekcji II tej pracy, zastosowano PHONOPY oraz DFPT (czyli $T=0$). Zatem jaki był cel zastosowania MD (wynik prezentowany na Fig. 1(e)) w kontekście fononów? Informacja ta nie jest podana w tekście. Po za oscylacją średniej „free energy” wokół pewnej wartości, wynik ten nie gwarantuje braku miękkich modów i stabilności układu w $T=300$ K dla danej symetrii, a pokazuje jedynie, że w trakcie (względnie krótkiej) symulacji nie nastąpiło przejście strukturalne. Natomiast warto zauważyć że wynik obliczeń MD może zostać zastosowany do określenia relacji dyspersyjnej w $T=300$ K – dlaczego więc tego nie zrobiono?

Wkład doktoranta w powstawanie publikacji.

W sekcjach dot. publikacji naukowych brak informacji dot. wkładu doktoranta – wkład ten jest „opisany” w oświadczeniach autorów oraz samego doktoranta (osobne załączniki do rozprawy). Rozprawa oparta jest na trzech publikacjach, opublikowanych w Phys. Rev. Research oraz Phys. Rev. B (dwie prace). W pracach tych, doktorant jest pierwszym autorem, przy czym prace te zawierają od 7 do 10. Jak wspomniałem wcześniej



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptak,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

– wkład doktoranta oraz współautorów przedstawione są w osobnych załącznikach. Są one jednak przygotowane w sposób bardzo pobieżny, i enigmatycznie stwierdzają:

„The most of the work of the above papers are done by me.” – w oświadczeniu doktoranta,
„I declare that my contribution [...] has been related to discussion on the scientific project and results as well as the writing part of the paper.” – w przypadku wszystkich pozostałych oświadczeń współautorów.

Powstaje zatem pytanie, czy konieczna była tak liczna grupa współautorów, skoro większość „pracy” została wykonana przez doktoranta, a żaden ze współautorów nie jest w stanie wskazać konkretnego fragmentu który „wykonał”.

Jakość rozprawa.

W moim odczuciu rozprawa przygotowana została pośpiesznie i niedokładnie (o czym świadczą opisane wcześniej błędy edycyjne, braki w opisach itd.) W przyszłości, zalecam jednak większą staranność w przygotowywaniu tekstów.

Częsty jest brak spacji – szczególnie pomiędzy tekstem, a referencjami. Część rysunków jest zdecydowanie za mała, co zmniejsza ich czytelność. Rysunki te, w większości prezentują strukturę pasmową, lub powierzchniową funkcję Greena, czyli struktury zazwyczaj bardzo złożone – których szczegóły są bardzo istotne – rozmiar rysunków w publikacjach APS nie jest ograniczony, mogły być one zatem wykonane w formie dwukolumnowej.

Bibliografia w rozprawie (strona 107) przyjmuje formę dosyć nietypowego odwołania do referencji, w postaci: *Autor, Tytuł, Czasopismo, Tom(Wolumen):Strony, Rok*. Przyjęta forma nie jest jednolita dla wszystkich rekordów, czasem podawane referencje posiadają zapis *Strona* od-do, inne tylko nr. pierwszej strony – korzystniej byłoby przyjąć jednolitą formę. Pojawiają się również przeoczenia dot. zapisu nazw *Czasopism* oraz formuł chemicznych. W tym przypadku, autor nie dołożył należytej staranności w sprawdzeniu referencji. Czasem używa zapisu *Review of Modern Physics* (ref. 24), innym razem *Review of modern physics* (ref. 25) – przy czym pierwszy zapis jest preferowany; podobnie w przypadku *Physical review letters* (w ref. 5, 6, 7, 8, 9, itd.) – powinna być *Physical Review Letters*. Tytuły referencji również nie zostały odpowiednio zredagowane: np. indeks topologiczny Z_2 (w tytule ref. 9 oraz ref. 28), nazwiska z małej litery (np. *dirac* w ref. 13 lub ref. 16, *hall* w ref. 19, czy *van der waals* w ref. 20), oraz formuły chemiczne (np. *snte* w ref. 15, *mnbi2te4* w ref. 19 oraz ref. 20, *insulator-bi4br4* w ref. 31, *bi2se3*, *bi2te3 and sb2te3* w ref. 32, oraz inne).

Cel pracy praktycznie nie jest zdefiniowany – brak sekcji 1.2 kończącej rozdział 1. Brak również jasnego podsumowania, choć jest on wspomniany w tytule rozdziału 3.



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

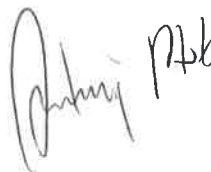
**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

AP

Podsumowując, rozprawa pan mgr Rajibul Islam ma formę zbioru artykułami naukowymi (zgodnie z Art. 187.3 Ustawy *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce*). **Z przykrością muszę jednak stwierdzić, że jakość przedstawionej rozprawy jest relatywnie niska – w moim odczuciu nie spełnia ona wymogów ustawowych stawianych rozprawom naukowym (Art. 187.1 i 187.2 Ustawy *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce*). Jakość oraz forma przygotowanej rozprawy (omówione w licznych uwagach opisanych wcześniej) budzą moje poważne wątpliwości dot. umiejętności samodzielnego prowadzenia pracy naukowej – enigmatyczne oświadczenia dot. wkładu autorów nie ułatwiają oceny umiejętności doktoranta; braki w rozdziale 2.3 rozprawy sugerują brak znajomości szczegółów zastosowanych technik. Problem naukowy rozwiązywany w ramach rozprawy, nie został podany – brakiem zdefiniowanego celu pracy (brakujący rozdział 1.2) oraz jasnego posumowania (pomimo tytułu rozdziału 3), czy cel ten został osiągnięty; ciężko stwierdzić czy doktorant był świadom jaki cel przyświeca wykonywanej pracy, skoro nie zdefiniował go w rozprawie. W związku z powyższym, wnoszę o nie dopuszczenie pan mgr. Rajibul Islam do publicznej obrony.**



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

**im. Henryka
Niewodniczańskiego**

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptak,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów