

Poznań, dnia 20 września 2023 roku

Prof. UAM dr hab. Anna Dyrdał  
Zakład Fizyki Mezoskopowej  
Instytut Spintroniki i Informatyki Kwantowej, Wydział Fizyki  
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu  
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 2, 61-614 Poznań

## RECENZJA ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Pana mgr. Saeeda Samadi Bahnemiri

pt. *Topological properties of selected IV-VI semiconductor nanostructures*

Pan magister Saeed Samadi Bahnemiri przygotował rozprawę doktorską pod tytułem „*Topological properties of selected IV-VI semiconductor nanostructures*” pod kierunkiem Profesora dra hab. Ryszarda Buczko w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. Rozprawa doktorska napisana jest w języku angielskim i zawiera 6 rozdziałów, w tym Wstęp i Podsumowanie oraz Dodatek. Praca opatrzona została także Streszczeniem w języku polskim i angielskim. Wyniki oryginalne Autora, których część została opublikowana w tym roku w Physical Review B (pozycja literaturowa w rozprawie nr 133) opisane są w Rozdziale 5. Całość pracy liczy 133 strony i zawiera 151 pozycji literaturowych.

Tematyka rozprawy jest ambitna i bardzo aktualna. Doktorant postanowił zbadać własności topologiczne wybranych nanostruktur na bazie półprzewodników IV-VI, należących do klasy tzw. krystalicznych izolatorów topologicznych (TCIs) z bezprzerwowymi diracowskimi stanami powierzchniowymi. W swoich badaniach Doktorant skupił się na roli zbliźniaczeń (TP), tj. regularnych zrostów - defektów - w strukturze krystalicznej w płaszczyźnie (111), na własności topologiczne krystalicznych izolatorów topologicznych. Do analizy wybrane zostały trzy typy nanostruktur: supersieci, cienkie warstwy oraz nanodrutki oparte na SnTe. Aby scharakteryzować własności topologiczne powyższych nanostruktur doktorant musiał opanować metody numeryczne umożliwiające obliczenia struktury pasmowej, rozwijane w zespole prof. Buczko, oraz wiedzę z zakresu topologicznych własności materii, w tym metody obliczania niezmienników topologicznych.

Rozdział 2 Rozprawy zawiera wprowadzenie do własności topologicznych materii. Autor przedstawia w nim podstawowe informacje niezbędne do scharakteryzowania elektronowej struktury pasmowej pod kątem jej własności topologicznych. Pojawia się więc koncepcja adiabatycznej ewolucji cyklicznej i geometrycznej fazy funkcji falowej znanej jako faza Berry’ego, która zostaje następnie zastosowana w opisie ewolucji blochowskiej funkcji falowej elektronów w ciele stałym. Doktorant pokazuje związek krzywizny Berry’ego z liczbą Cherna oraz wprowadza pojęcie „bulk-boundary correspondence”. W podrozdziale 2.6 doktorant przytacza najważniejsze modele teoretyczne opisujące wybrane układy o nietrywialnych własnościach topologicznych. Na początku pojawia się historycznie pierwszy układ o własnościach topologicznych, a więc układ w którym realizuje się całkowity kwantowy efekt Halla. Autor zwraca uwagę na teorię TKNN, która łączy liczbę Cherna z kwantowym przewodnictwem Halla. Następnie Doktorant opisuje tzw. izolatory Cherna, skupiając się na modelu Qi-Wu-Zhang’a (QWZ). Na przykładzie tego modelu Autor przedstawia obliczenia krzywizny Berry’ego, liczby Cherna, przewodnictwa holowskiego oraz stanów krawędziowych. Dalej

Autor omawia izolatory topologiczne z zachowaną symetrią względem odwrócenia czasu na przykładzie modelu Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ). W tym podrozdziale wprowadzony jest także niezmiennik topologiczny  $Z_2$  i metody jego wyznaczania.

Rozdział 3 stanowi wprowadzenie do fizyki krystalicznych izolatorów topologicznych - klasy materiałów topologicznych wprowadzonej przez Lianga Fu w 2011 roku, w których własności topologiczne struktury pasmowej związane są ściśle z szczególną symetrią krystalicznej grupy punktowej materiału, która skutkuje odpowiednią symetrią ułożenia atomów przy powierzchni kryształu. Są to materiały z chronioną symetrią lustrzaną. Autor definiuje tzw. lustrzane liczby Cherna (ang. *mirror Chern numbers*), a następnie opisuje strukturę pasmową krystalicznych izolatorów topologicznych IV-VI o ogólnym wzorze  $Pb_{x-1}Sn_xTe$ . Na przykładzie czteropasmowego Hamiltonianu  $k.p$  opisującego półprzewodniki IV-VI w sąsiedztwie punktu L strefy Brillouina oraz obliczeń z pierwszych zasad Doktorant pokazuje różnice w strukturze pasmowej SnTe i PbTe, wskazując na istnienie odwróconej struktury pasmowej w SnTe i istnienie fazy krystalicznego izolatora topologicznego, podczas gdy PbTe jest trywialnym izolatorem. Następnie scharakteryzowane są stany powierzchniowe TCI dla powierzchni (111) i (001). W podrozdziale 3.2.3 zamieszczony został przegląd topologicznych faz cienkich warstw SnTe. Rozdział 3.3. Zawiera krótką wzmiankę o wpływie zaburzeń na stany powierzchniowe TCI. Doktorant zwraca szczególną uwagę na zniekształcenia strukturalne, magnetyczne domieszki oraz naprężenia mechaniczne. W rozdziale 3.4. Doktorant wprowadził pojęcie topologicznych izolatorów wyższego rzędu (HOTIs) oraz wskazał, że możliwe jest zrealizowanie HOTI w strukturach SnTe.

W Rozdziale 4 zawarty został opis metod stosowanych przez Doktoranta. W szczególności znajdujemy tu wprowadzenie do modelu ciasnego wiązania, formalizm Slater'a-Koster'a oraz krótki opis metody iteracyjnej opartej o funkcje Greena. Pod koniec podrozdziału 4.1 Autor podaje krótkie doprecyzowanie założeń modelu ciasnego wiązania zastosowanego w obliczeniach doktoranta. Tu autor pisze „our TB code”. Chciałabym aby Autor w trakcie obrony doprecyzował co oznacza to stwierdzenie. Czy Doktorant tylko pracował na kodzie rozwijanym przez Pana prof. Buczko i jego współpracowników, czy może w jakimś zakresie go rozwinął?

Rozdział 5 zawiera oryginalne wyniki uzyskane przez Doktoranta. Rozdział ten podzielony jest na 4 podrozdziały opisujące supersieci, cienkie warstwy oraz nanodruły na bazie półprzewodników IV-VI posiadające strukturalne defekty w postaci zbliźniaczeń. W tym miejscu muszę podkreślić, że Autor wykazał się bardzo dużą pracowitością analizując ze szczegółami wiele układów, co z pewnością zaowocuje w przyszłości kolejnymi publikacjami z udziałem Doktoranta, oraz szerszą dyskusją literaturową wyników otrzymanych przez zespół profesora Buczko. W rozdziale 5.1 Doktorant rozważa supersieci na bazie SnTe ze zbliźniaczeniami w płaszczyźnie (111). Zbliźniaczenia występują w superkomórce w dwóch płaszczyznach, tak, że każda z nich stanowi lokalną płaszczyznę symetrii lustrzanej. Badane supersieci można podzielić na trzy kategorie, w zależności od tego na której warstwie, kationowej czy anionowej, występują defekty. Tak więc rozważono supersieci kation-kation (cat-cat) i anion-anion (an-an) należące do przestrzennej grupy symetrii  $P6_3/mmc$  oraz supersieci mieszane kation-anion (cat-an) z przestrzenną grupą symetrii  $P\bar{6}m2$ . Autor rozważył najpierw własności topologiczne struktury pasmowej supersieci z różnymi położeniami płaszczyzn na których pojawia się zbliźniaczenie. W Rozdziale 5.1.2. znajdujemy struktury pasmowe dla supersieci o grubości 200 warstw atomowych, wykreślone wzdłuż ścieżek  $\Gamma-M-K-\Gamma$  oraz  $\Gamma-A-L-M-\Gamma$  (ponadto w Dodatku A zamieszczono struktury pasmowe dla ścieżki  $A-L-H-A$ ). Z otrzymanych struktur widać, że stany zlokalizowane na płaszczyznach bliźniaczych wbudowują się w obszar przerwy energetycznej. Wyznaczone zostały także niezmienniki topologiczne  $Z_2$  (dla TSL z symetrią inwersji - przy pomocy metody zaproponowanej przez Fu i Kane; dla TSL bez symetrii inwersji - przy pomocy metody zaproponowanej przez Fukui) oraz lustrzane liczby Cherna (ang. *mirror Chern numbers*) przy pomocy metody Fukui. I tak, lustrzane liczby Cherna dla

płaszczyzny  $\Gamma MK$  wynoszą dla supersieci posiadających płaszczyzny zbliźniczeń w warstwach kation-kation 4, anion-anion 2, a dla zbliźniczeń w warstwach kation-anion 3. W przypadku płaszczyzny  $ALH$  liczby Cherna wynoszą 0 dla TSL typu kation-kation i anion-anion, natomiast dla TSL typu kation-anion 1. Dla płaszczyzny lustrzanej  $(\bar{1}\bar{1}0)$  odpowiadającej płaszczyźnie  $AL\bar{M}$  lustrzane liczby Cherna wynoszą 2 dla każdego typu TSL. Zatem analiza lustrzanych liczb Cherna dla płaszczyzny  $\Gamma MK$  pokazuje, że wybrane trzy typy TSL (cat-cat, an-an oraz cat-an) należą do różnych klas topologicznych. Podrozdział 5.1.3 zawiera szczegółową analizę zachowania krzywizny Berry'ego oraz wyniki jej lokalnego całkowania wokół punktów wysokiej symetrii, które potwierdzają wyniki otrzymanych wcześniej lustrzanych liczb Cherna. W Podrozdziale 5.1.4 dyskutowane są natomiast stany powierzchniowe dla supersieci ze zbliźniczeniami. W analizie wykorzystana została metoda rekurencyjna funkcji Greena do Hamiltonianu ciasnego wiązania opisującego półnieskończoną supersieć zakończoną powierzchnią o jednej z dwóch orientacji prostopadłych do osi wzrostu kryształu, czyli  $(\bar{1}\bar{1}0)$  oraz  $(1\bar{1}\bar{2})$ . Zaprezentowane funkcje spektralne dla powierzchni  $(\bar{1}\bar{1}0)$  we wszystkich typach analizowanych supersieci przedstawiają dwa energetycznie rozsunięte punkty Diraca w  $\bar{M}$  oraz dwa wtórne (ang. *secondary*) punkty Diraca w środku przerwy przesunięte względem punkt  $\bar{M}$  w kierunku punktu  $\bar{\Gamma}$ . Dodatkowo spektrum cat-cat TSL wykazuje podobną strukturę w okolicy punktu  $\bar{\Gamma}$ , z wtórnymi punktami Diraca w przerwie, przesunięte względem  $\bar{\Gamma}$  w kierunku  $\bar{M}$ , natomiast spektrum an-an TSL wykazuje stany powierzchniowe z przerwą w punkcie  $\bar{\Gamma}$ . W przypadku sieci cat-an TSL występują natomiast pojedyncze chronione topologicznie punkty Diraca w punkcie  $\bar{\Gamma}$  i  $\bar{A}$ . W przypadku powierzchni  $(1\bar{1}\bar{2})$  otrzymane stany powierzchniowe wzdłuż  $\bar{M}-\bar{\Gamma}$  są jakościowo podobne do tych dla powierzchni  $(\bar{1}\bar{1}0)$ . Dodatkowo dla powierzchni  $(1\bar{1}\bar{2})$  wzdłuż linii  $\bar{\Gamma}-\bar{A}$  pojawiają się dodatkowe stany Diraca (Dirac crossing), które są konsekwencją faktu, że symetria lustrzana  $(\bar{1}\bar{1}0)$  nie jest złamana przez terminację na powierzchni  $(1\bar{1}\bar{2})$ . Doktorant następnie przeprowadza argumentację dla istnienia obliczonych bezprzerwowych stanów powierzchniowych, opartą o obliczone krzywizny Berry'ego.

W Rozdziale 5.2 Doktorant przeprowadza analizę podobną do tej z Rozdziału 5.1.1, ale dla dwuwymiarowej warstwy z globalną symetrią lustrzaną względem  $(111)$  z jedną zbliźniczoną powierzchnią (kationową oraz anionową) o grubości wykluczającej hybrydyzację pomiędzy stanami powierzchniowymi i stanami zlokalizowanymi na zbliźniczeniu. Doktorant analizuje zarówno sytuację gdy stany powierzchniowe nie są zaburzone (można zaobserwować wówczas 4 powierzchniowe stożki Diraca - jeden w pkt.  $\bar{\Gamma}$  i 3 w punkcie  $\bar{M}$ ) oraz przypadek gdy zaburzenie (tutaj *valley-mixing*) otwiera przerwę w stanach powierzchniowych. Analiza ta pozwala dużo lepiej zrozumieć wpływ zbliźniczeń na strukturę pasmową dwuwymiarowych nanostruktur.

Rozdział 5.3 zawiera natomiast bardzo cenną dyskusję dotyczącą realizacji spinowego efektu Halla w cienkiej warstwie zorientowanej w kierunku wzrostu  $(111)$  i zawierającej krystaliczne defekty w postaci zbliźniczeń. Dla półprzewodników IV-VI będących krystalicznymi topologicznymi izolatorami faza kwantowego spinowego efektu Halla została przewidziana teoretycznie dla warstw wzrastających w kierunku  $[111]$  dla pewnego zakresu grubości warstw, co ma związek z hybrydyzacją stanów powierzchniowych, prowadzącą do pojawienia się fazy 2D TI, z niezmiennikiem topologicznym  $Z_2$ , chronionej przez symetrię względem odwrócenia czasu. Faza kwantowego spinowego efektu Halla jest tu związana z faktem, że 4 punkty L rzutowane na dwuwymiarową strefę Brillouina nie są ekwiwalentne. Gdy więc struktury energetyczne w trzech projekcjach  $\bar{M}$  są symetryczne to struktura energetyczna w czwartej projekcji w punkcie  $\bar{\Gamma}$  jest odmienna, co powoduje, że możliwe jest odwrócenie struktury pasmowej w nieparzystej liczbie punktów dwuwymiarowej strefy Brillouina. Autor rozprawy przeprowadził analizę oscylacji szerokości przerwy energetycznej oraz niezmienników topologicznych w funkcji liczby warstw atomowych składających się na badane cienkie warstwy. W przypadku braku defektów struktury krystalograficznej wiadomo, że stan izolatora z kwantowym spinowym efektem Halla jest obserwowany zarówno dla parzystej jak i nieparzystej liczby warstw atomowych. Doktorant zbadał sytuację gdy zbliźniczenie obecne jest w środku struktur

z nieparzystą liczbą warstw atomowych, dla których obliczył niezmiennik  $Z_2$  przy wykorzystaniu metody Fu-Kane'a oraz lustrzaną liczbę Cherna. Przeanalizował 4 przypadki: warstwa zakończona płaszczyzną anionową ze zbliżnieniem w warstwie anionowej oraz ze zbliżnieniem w warstwie kationowej, oraz warstwa zakończona płaszczyzną kationową ze zbliżnieniem w warstwie kationowej oraz ze zbliżnieniem w warstwie anionowej. Doktorant wskazuje, że w warstwach z zbliżnieniem kationowym odwrócenie pasm zachodzi dla grubości między 15 a 29 monowarstw, 33 monowarstw oraz dla grubości między 51 a 59 monowarstw, natomiast dla zbliżeń anionowych inwersja pasm następuje dla warstw o grubościach od 21 do 27 monowarstw, oraz dla warstw o grubości 31 i 57 monowarstw. Dla cienkich warstw o grubościach 9, 21, 41 i 57 monowarstw Doktorant prezentuje krzywizny Berry'ego zarówno dla struktur ze zbliżnieniem anionowym jak i kationowym oraz dyskutuje ich własności topologiczne. Następnie w podrozdziale 5.3.2 Autor wykorzystuje iteracyjną metodę funkcji Greena do obliczenia krawędziowych funkcji spektralnych dla badanych układów. Tutaj Autor rozważa warstwę zakończoną powierzchnią kationową z kationowym typem zbliżenia oraz warstwę zakończoną powierzchnią anionową o anionowym typie zbliżenia. Doktorant wyznaczył stany typu *bulk* oraz stany krawędziowe dla cienkiej warstwy (111), złożonej z 13 i 21 monowarstw, oraz spinową gęstość stanów dla jednowymiarowej strefy Brillouina dla krawędzi  $[11\bar{2}]$ . Znaleziono zostały bezprzerwowe stany krawędziowe w punkcie  $\bar{\Gamma}$  z niezmiennikiem topologicznym  $Z_2$  równym 1 oraz z lustrzaną liczbą Cherna równą +1 dla struktury zakończonej warstwą anionową oraz -1 dla struktury zakończonej warstwą kationową.

W Rozdziale 5.4 Autor rozważa nanodrutu zbudowane z krystalicznego izolatora topologicznego wzrastające w dwóch kierunkach: w kierunku  $[011]$  z pięciokątnym przekrojem poprzecznym oraz w kierunku  $[001]$  o kwadratowym przekroju poprzecznym. W pierwszej kolejności Doktorant analizuje strukturę pasmową pięciokątnego nanodrutu SnTe (podrozdział 5.4.1.2) która posiada zarówno stany powierzchniowe jak i typowe dla nanodrutów topologiczne stany rdzenia (TCS, ang. *topological core states*), oraz tzw. stany *hinge*. Autor szczegółowo dyskutuje koegzystencję tych stanów obrazując stany rdzenia, stany typu *hinge* oraz stany powierzchniowe krystalicznego izolatora topologicznego. Doktorant zwraca uwagę m.in. na fakt, że stany typu *hinge* hybrydują ze sobą i ze stanami powierzchniowymi. W dalszej części rozdziału Pan Samadi Bahnemiri dokonuje dekompozycji Hamiltonianu zapisanego w podprzestrzeniach stanów operatora symetrii  $C_5$  i pokazuje istnienie bezprzerwowych stanów rdzenia o przeciwnej chiralności do stanów typu *hinge*. Tu należy zaznaczyć, że zgodnie z wynikami jakie otrzymał doktorant, topologicznie nietrywialne stany otrzymuje się tylko dla nanodrutu z zbliżnieniami kationowymi, podczas gdy w nanodrucie z zbliżnieniami anionowymi bezprzerwowe mody są nieobecne. Dość podobnie zachowuje się nanodrut pięciokątny ze stopu  $Pb_{0.6}Sn_{0.4}Se$ , w którym dla kationowych zbliżeń Autor rozprawy znalazł topologiczne stany rdzenia i topologiczne stany krawędziowe, podczas gdy w przypadku anionowego zbliżenia pojawia się *anti-crossing* i trywialne zachowanie stanów powierzchniowych i stanów rdzenia. W podrozdziale 5.4.1.4 Doktorant analizuje natomiast nanodrut z SnTe, którego ściany boczne utworzone są z płaszczyzn  $(21\bar{1})$ . W tym przypadku płaszczyzny zbliżeń tworzą płaszczyznę normalną do łaszczyzny  $(21\bar{1})$  i tną w połowie każdą z pięciu ścian bocznych nanodrutu. Z przeprowadzonej analizy wynika, że pojedynczy stan topologiczny rdzenia jest niezależny od topologicznych własności indywidualnych zbliżeń i jest nieczuły na położenie płaszczyzn zbliżeń tak długo jak tylko zachowana jest symetria  $C_5$ . W podrozdziałach 5.4.1.5 i 5.4.1.6 Doktorant szczegółowo bada zachowanie stanów typu *hinge* i stanów rdzenia. Na zakończenie Rozdziału 5 Autor analizuje stany typu *hinge* i efekt ich hybrydyzacji dla nanodrutu o przekroju kwadratowym.

W Rozdziałach 5.2.3, 5.4.1.2 oraz 5.4.1.6 Doktorant podkreśla rolę Pana Rafała Rechcińskiego w przeprowadzonych analizach. Ponieważ w publikacji [133] autorami są zarówno Pan Saeed Samadi Bahnemiri jak i Pan Rafał Rechciński, a publikacja jest jedyną dotąd opublikowaną pracą Doktoranta jaką udało mi się znaleźć, chciałabym aby w trakcie obrony Doktorant wyjaśnił

dokładnie wkład swój i Pana Rechcińskiego w publikację. Chciałabym się dowiedzieć, czy stwierdzenia: “*Rafał Rechciński (...) has explored and implemented two methodologies in this Research [133]*”, oraz “*analysis conducted by Rafał Rechciński*” oznaczają, że Pan Rechciński wykonał jedynie analizę wyników, a za obliczenia numeryczne odpowiedzialny był Doktorant, czy też stwierdzenia te oznaczają, że za całość uzyskanych wyników (obliczenia oraz analiza) odpowiedzialny był Pan Rechciński.

Podsumowując całość rozprawy doktorskiej uważam, że tematyka pracy obejmuje bardzo ciekawe zagadnienia dotyczące topologicznych własności nanostruktur opartych o krystaliczne izolatory topologiczne. Praca zawiera wiele oryginalnych wyników. Autor bardzo szczegółowo zbadał rolę zblizniaczeń na własności topologiczne supersieci i nanodrutów SnTe. Szczególnie wartościowe i godne docenienia są wyniki uzyskane w rozdziale 5.3, w którym Doktorant zbadał cienkie warstwy SnTe o różnych grubościach i typach zblizniaczeń pod kątem realizacji fazy kwantowego spinowego izolatora topologicznego, oraz w rozdziale 5.4, w którym Doktorant badał wpływ zblizniaczeń na własności topologiczne nanodrutów i pokazał m.in., że w przypadku drutów z pięciokątnym przekrojem poprzecznym stany nietrywialne topologicznie pojawiają się tylko wtedy gdy faza topologiczna materiału z którego wykonany jest drut jest topologicznie nietrywialną oraz gdy pięć zblizniczonych płaszczyzn tworzących nanodrut jest typu kationowego. Doktorat przeprowadził szereg obliczeń aby uzyskać pełną informację o strukturze pasmowej, własnościach topologicznych i roli zblizniaczeń w badanych nanostrukturach. Całość pracy napisana jest w sposób czytelny oraz logicznie spójny. Istnieją pewne niedociągnięcia językowe, na które z powinności recenzenckiej muszę zwrócić uwagę, ale nie wpływają one na czytelność i zrozumienie treści. Rozprawa została również przygotowana bardzo starannie od strony szaty graficznej, co jest warte podkreślenia z uwagi na bardzo dużą liczbę danych i wykresów.

W związku z powyższym nie mam wątpliwości, że przedłożona mi do recenzji rozprawa doktorska spełnia ustawowe wymagania stawiane pracom doktorskim oraz wnoszę o dopuszczenie magistra Saeed Samadi Bahnemiri do dalszych etapów postępowania w procesie o nadanie stopnia naukowego doktora.

Anna Dyrdał

