

Warszawa 26.10.2023 r.

Uniwersytet Warszawski

Prof. Jakub Tworzydło

+48-225532919; jakub.tworzydlo@fuw.edu.pl

ulica Pasteura 5, 02-093 Warszawa, Polska



Recenzja rozprawy doktorskiej
magistra Saeed Samadi Bahnemiri
pt. „Topological properties of selected IV-VI semiconductor nanostructures”

Praca doktorska mgr. Saeed Samadi Bahnemiri została przygotowana w języku angielskim. Praca liczy 120 stron, zawiera 151 odnośników literaturowych, ilustrowana jest 62 rysunkami. Struktura formalna pracy obejmuje wstęp, trzy rozdziały wprowadzające stosowane metody teoretyczne (rozd. 2, rozdz. 3 i rozdz. 4) oraz obszerny rozdział 5 zawierający wyniki badawcze uzyskane przez doktoranta. Podział formalny pracy nie jest równomierny, rozdział 5 obejmuje przeszło połowę objętości pracy, natomiast rozdział 4 liczy zaledwie 8 stron. Z punktu widzenia czytelnika łatwiej byłoby obcować z manuskryptem, którego struktura jest bardziej zrównoważona. Tym niemniej układ pracy jest logiczny i dobrze odzwierciedla zasadnicze tezy rozprawy.

Ocena części wstępnej pracy.

Wstępna część pracy, pozostając w zgodzie z przyjętym tytułem całej rozprawy, z konieczności obejmuje dość szeroką tematykę. Omówione zostały własności topologiczne materiałów w opisie pasmowym (rozd. 2), wybrane własności kryształów i nanostruktur zbudowanych z materiałów półprzewodnikowych typu IV-VI (rozd. 3), oraz metody modelowania stanów elektronowych w strukturach krystalicznych (rozd. 4). Wybór tych zagadnień jest jak najbardziej właściwy, choć sama prezentacja zawiera szereg mankamentów.

Rozdz. 1 zatytuowany „Wstęp” lakonicznie przedstawia najważniejsze części pracy. W niektórych stwierdzeniach autor upraszcza opis do tego stopnia, że staje się niezrozumiały. Zdanie “topological classification (...) focuses on the examination of global characteristics employing topological invariants” w moim odbiorze zawiera błąd logiczny polegający na wyjaśnieniu nieznanego (czytelnikowi) pojęcia “topological classification” przez to samo pojęcie w innym ujęciu “topological invariants”. Na skutek podobnej dążności autora do maksymalnej koncentracji stwierdzeń zdanie “the role of time-reversal symmetry breaking in maintaining the crystal’s periodicity” staje się nieprawdziwe. Symetria odwrócenia w czasie zdecydowanie nie może być przyczyną utrzymania periodyczności struktury krystalicznej. Z pozytywnych stron opisu umieszczonego we “Wstępie” uwypukliłbym klarowne przedstawienie celu pracy oraz syntetyczne ujęcie uzyskanych wyników.

Rozdz. 2 nosi tytuł “Topological states of matter”. Tytuł ten autor wprowadził mocno na wyrost, bowiem przedstawiony materiał dotyczy znacznie węższego zakresu zagadnień, mianowicie faz topologicznych związanych z opisem pasmowym elektronów nieoddziałujących. Zazwyczaj o “topologicznych stanach materii” mówimy szerzej, także w kontekście układów oddziałujących takich jak np. stany w ułamkowym kwantowym efekcie Halla.

Prezentacja materiału teoretycznego w tym rozdziale ma charakter sprawozdania z podręcznikowych ujęć. W zasadzie bez większych innowacji autor przytacza znane wyprowadzenia, przy czym pomija trudniejsze wyniki (np. brak uzasadnienia równoważności postaci krzywizny Berry’ego podanej w (2.12) z (2.16)). Mocną stroną tego rozdziału są ilustracyjne rysunki i wykresy, sporządzone przez samego autora. Rysunki są bardzo ładnie opracowane, czytelne, dobrze dobrane. Ciekawym, innowacyjnym elementem jest wynik przedstawiony w podrozdziale 2.6.3.5. Posługując się prostym, modelowym hamiltonianem autor testuje numeryczną metodę (rozumiem, że rozwiniętą na potrzeby tej pracy), która pozwala znajdować niezmienniki topologiczne dla struktury pasmowej nie posiadającej symetrii inwersji. Temu, tym razem poza-podręcznikowemu rozszerzeniu głównego wywodu towarzyszy ilustracja z rys. 2.10 zawierająca kolorową mapę spinowo-rozdzielczej funkcji spektralnej układu topologicznie trywialnego ($\nu=0$) oraz nietrywialnego ($\nu=1$).

Numeryczne badanie niezmienników topologicznych, a także wgląd w pędkową zależność krzywizny Berry’ego zapewnia autorowi metoda Fukui-Hatsugai. Stanowi ona centralne, metodologiczne narzędzie autora, i jako takie powinna być w moim przekonaniu starannie

przedstawiona. Implementacja numeryczna ogólnych wzorów ze wstępu (np. wzmiankowanych tu (2.12) lub (2.16)) nie jest oczywista, napotyka pewne przeszkody. Opis trudności i zastosowanego rozwiązania autor potraktował bardzo skrótowo (pojedynczy paragraf na str. 29), w wyniku czego ten fragment pracy jest praktycznie nieczytelny. Oczekiwałam, że w ramach obrony autor przedstawi tę metodę na tyle obszernie, aby potwierdzić swoją biegłość teoretyczną.

Kolejny rozdział (rozd. 3) nosi tytuł “Topological crystalline insulators”, który dobrze oddaje jego treść. Zawiera przegląd rezultatów z literatury z ostatniej dekady, dotyczących izolatorów topologicznych ze stanami chronionych symetriami krystalicznymi (TCI). Tym razem rysunki ilustrujące tekst, choć nadal starannie opracowane, pochodzą jednak z prac innych autorów (w tym promotora prof. Buczki) i są umieszczone na zasadzie cytatu naukowego. Przegląd jest z konieczności skrótowy, ale dobór przykładów jest dobry, dostosowany do potrzeb całej rozprawy. Na pewno wartościowe jest ujęcie zagadnień ostatnio gorąco dyskutowanych przez licznych autorów, dotyczących stanów zawiasowych i izolatorów topologicznych wyższego rzędu. Brakuje mi w tym rozdziale prezentacji materiału wymagającego wkładu własnego autora. Z pewnością część ilustracji służących wprowadzeniom ujętym w tym rozdziale mogła być sporządzona (i przetestowana względem literatury) przy pomocy metod rozwiniętych na potrzeby badawcze w rozdz. 5.

Ułomnością tego rozdziału jest brak wprowadzenia czytelnika w zagadnienia szczególnego rodzaju układów, które stały się główną osią badań raportowanych w rozdz. 5 pracy. Takie pojęcia jak defekty typu płaszczyzny bliźniaczej (TP od „twin planes”) oraz supersieci zbudowane z takich defektów (TSL od „twin superlattices”) pojawiają się dopiero w rozdz. 5, i to w stylu eksperckim, skondensowanym i niewiele wyjaśniającym czytelnikowi. Właściwe miejsce na zaanonsowanie, zdefiniowanie i zilustrowanie przykładowych TP czy też TSL byłoby w tym rozdziale wstępnym, służyłoby też lepszemu umotywowaniu podjętych badań.

Najkrótszy rozdział pracy (rozd. 4) nosi tytuł „Metodologia”. Zawiera przede wszystkim wprowadzenie do modelowania stanów elektronowych w strukturach półprzewodnikowych IV-VI – poprzez przybliżenie ciasnego wiązania, ogólną parametryzację Slatera-Kostera oraz zbiorcze tabele parametrów dla stosowanych w pracy modeli. Do tej części rozdziału zasadniczo nie mam uwag.

W kolejnym kroku autor skrótowo przywołał sposób obliczania funkcji Greena i jednoczątkowej

gęstości stanów w geometrii układu pół-nieskończonego. Mimo, że autor musiał zastosować tę metodę do konkretnych obliczeń w dalszej części pracy, to przedstawione czytelnikowi sprawozdanie jest szczątkowe. Autor pisze ogólnikowo „this equation can be used to derive numerous other equations that combine block matrices” ale nie wyjaśnia jakie równania są wyprowadzane, w jaki sposób, ani jak je rozwiązać numerycznie. Podany jest oczywiście odnośnik do oryginalnej pracy, ale czytelnik (recenzent) nie otrzymuje w tym miejscu poświadczenia co do biegłości teoretycznej autora w stosowanej metodologii. Również kolega-doktorant, chcący nauczyć się czegoś o obliczaniu powierzchniowych gęstości stanów, nie skorzystałby wiele na tym podrozdziale.

Podsumowanie uwag o części wstępnej.

Autor dokumentuje znajomość zagadnień teoretycznych na podstawowym poziomie wymaganym od doktoranta, ale nie wykazuje biegłości ani dążenia do pogłębionego zrozumienia przedstawianych zagadnień.

Ocena części badawczej pracy.

Badawcza część pracy ujęta jest w rozdz. 5. Autor prezentuje teoretyczne wyniki uzyskane dla nanostruktur z półprzewodników II-VI. Wiodącym tematem badań są struktury, w których występuje pojedynczy, lub wielokrotny defekt płaszczyzny bliźniaczej. Rozdział zawiera bardzo starannie przygotowane rysunki i wykresy oraz dużo różnorodnych wyników, które są szczegółowo sprawozdane.

Podrozdział 5.1 to część oparta na obszernej pracy opublikowanej z promotorem. Sposób prezentacji i zawartość merytoryczna przedstawionych wyników nie budzi większych zastrzeżeń. Badane są stany w supersieciach płaszczyzn bliźniaczych, w szczególności: objętościowa struktura pasmowa układów, własności topologiczne tej struktury w ujęciu niezmienników zwierciadlanych Cherna oraz stany brzegowe supersieci. Rysunki i wykresy ilustrujące uzyskane wyniki są umieszczone na zasadzie naukowego cytatu z opublikowanej pracy. Ilustracje te są bardzo starannie przemyślane. Wnoszę stąd, że doktorant przygotowując publikację i rozprawę osiągnął biegłość nie tylko w generowaniu wyników, ale też w sposobie ich ilustracji i odpowiedniego doboru w celu uzyskania wysokiej jakości manuskryptu naukowego.

Podrozdział 5.2 stosuje bardzo podobną metodę naukową, ale do pojedynczej TP zamkniętej w geometrii płyty. Ta analiza pozwala lepiej zilustrować rolę TP w powstawaniu stanów topologicznych, jest komplementarna do wyników z rozdz. 5.1. Została umieszczona w rozprawie dla pełności prezentacji, ale jednocześnie dobrze dokumentuje wkład własny autora w prowadzone badania. Wyniki z rozdz. 5.2 wydają się potwierdzać wcześniejsze tezy, nie wnoszą jakościowo nowych efektów.

Ambitniejszą próbę poznawczą zawiera materiał przedstawiony w rozdz. 5.3. Autor stara się znaleźć optymalną konfigurację z TP obecną w cienkiej płycie, tak, aby możliwe stało się osiągnięcie QSHE (kwantowego spinowego efektu Halla) na stanach krawędziowych. Wyniki są interesujące, uzyskane dla bardziej realistycznych modeli ciasnego wiązania, mogą stać się wskazówką dla grup eksperymentalnych. Nie dostrzegam jednoznacznej konkluzji, że obecność TP jakościowo poprawia warunki do obserwacji QSHE. Prawdopodobnie temat wymaga szerszej eksploracji parametrów modelowych i rozszerzenia badań, aby uzyskać wyniki jakości publikacyjnej. W tekście rozprawy ten podrozdział ma jednak swoje miejsce, zawierając autorskie rozszerzenie wcześniejszych wyników promotora doktoratu. Paradoksalnie, obserwacja płaskich pasm krawędziowych (rys. 5.23 f) może być najciekawszym wynikiem tej linii badań. Na potrzeby obrony publicznej warto przemyśleć, czy, i w jakim stopniu płaskie pasma krawędziowe są stabilną w funkcji parametrów i wyraźną (lub unikalną) cechą badanych układów.

Ostatni rozdział pracy (rozd. 5.4) zawiera szczegółową analizę stanów elektronowych w nanodrutach z materiałów klasy SnTe. Celem jest poszukiwanie odpowiedniej geometrii i parametrów nanodrutów do obserwacji egzotycznych stanów zawiasowych i stanów rdzeniowych. Tematyka jest gorąco dyskutowana w środowisku badawczym, wyniki autora z tego rozdziału są na pewno wystarczająco obszerne i wyczerpujące, aby stać się materiałem oddzielnej publikacji w renomowanym czasopiśmie międzynarodowym. Rozważane nanodruły mają dość wyjątkową, pięciokrotną symetrię. Taka konfiguracja atomowa jest możliwa do skonstruowania dzięki pięciokrotnemu zastosowaniu defektów TP, wynikowa struktura niemal nie ma naprężeń. Proponowana struktura nawiązuje zatem w bardzo elegancki sposób do wcześniejszych badań własności stanów topologicznych w obecności defektów TP. Podkreślam bardzo dobrą zawartość merytoryczną tego rozdziału, oraz nowatorską dyskusję stanów topologicznych w obecności nieoczywistej, 5-krotnej symetrii.

Podsumowanie oceny części badawczej.

Doktorant uzyskał istotne naukowe wyniki i potrafił przedstawić je w merytorycznie poprawnym tekście naukowym niniejszej rozprawy. Poprawnie stosował i konsekwentnie rozwijał przyjętą metodologię. Opisane wyniki dokumentują postęp w rozumieniu teoretycznym zaawansowanych zagadnień fizyki stanów topologicznych chronionych różnorodnymi symetriami krystalicznymi.

Konkluzja.

Stwierdzam, że przedstawiona do oceny praca przygotowana przez mgr. Saeed Samadi Bahnemiri pt. „” spełnia ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Uważam, że naukowa jakość uzyskana przez kandydata zadowala zwyczajowe oczekiwania formułowane w postępowaniu doktorskim. Wnoszę o przekazanie postępowania do dalszych kroków, w tym do publicznej obrony rozprawy.

Warszawa, 26.10.2023 r.

