

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

AGH

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

KATEDRA FIZYKI MATERII SKONDENSOWANEJ

Kraków, 24.09.2024

dr hab. inż. Bartłomiej Wiendlocha, prof. AGH

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Akademii Górniczo-Hutniczej im. St. Staszica w Krakowie

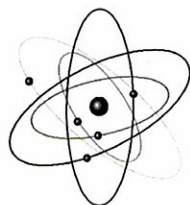
Recenzja rozprawy doktorskiej pt. "Thermoelectric phenomena in topological materials" autorstwa MSc. Md Shahina Alama.

Rozprawa doktorska pt. "Thermoelectric phenomena in topological materials" autorstwa MSc. Md Shahina Alama została wykonana pod kierunkiem dr hab. Marcina Matusiaka, prof. IF PAN w Międzynarodowym Centrum Sprzężenia Magnetyzmu i Nadprzewodnictwa z Materią Topologiczną MagTop i Instytucie Fizyki PAN w Warszawie. Rozprawa napisana jest w języku angielskim, liczy 120 stron i ma formę zbioru trzech publikacji naukowych poprzedzonych wprowadzeniem i zakończonych podsumowaniem oraz bibliografią. Temat rozprawy jest sformułowany bardzo ogólnie i wykracza znacznie poza zagadnienia poruszone w rozprawie. Nurtem przewodnim pracy są badania nad własnościami elektronowymi trzech wybranych półmetali topologicznych: TaAs_2 , CeAlSi i $\alpha\text{-Sn}$. W szczególności, Autor prezentuje wyniki pomiarów oporności elektrycznej i termosily w funkcji pola magnetycznego i temperatury dla różnych konfiguracji geometrycznych przyłożonych do materiału pół. Umożliwia to m.in. obserwacje oscylacji kwantowych Shubnikova-de Haasa, anomalnego efektu Halla i Nernsta, których analiza, wsparta obliczeniami teoretycznymi, dostarcza informacji na temat topologicznych własności transportu elektronowego w materiałach.

W rozdziale 1 Autor krótko wprowadza w tematykę półmetali topologicznych Diraca i Weyla, które różnicuje ze względu na strukturę pasmową. Następnie przybliża tematykę ich własności transportowych, podając podstawowe informacje na temat oscylacji kwantowych, anomalnych efektów Halla i Nernsta oraz

Akademia Górniczo-Hutnicza | Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Katedra Fizyki Materii Skondensowanej

al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków,
tel. +48 12 617 29 53, fax +48 12 634 00 10
e-mail: sekretariat@fis.agh.edu.pl, www.fis.agh.edu.pl/



anomalii chiralnej, prowadzącej do powstania chiralnego przewodnictwa. Następnie podane są elementarne wzory opisujące termosilę. Jak na pracę mającą w tytule "zjawiska termoelektryczne" podrozdział ten mógłby być obszerniejszy i zawierać formuły łączące termosilę ze strukturą pasmową materiału. Rozdział pierwszy kończy się podaniem celu rozprawy, który sformułowano jako zbadanie własności transportowych trzech topologicznych półmetali Weyla:

1. TaAs₂, który jest półmetalem Diraca i w którym przewidywano powstanie stanu półmetal Weyla pod wpływem zewnętrznego pola magnetycznego;
2. ferromagnetycznego CeAlSi, w którym, poza stanem magnetycznym, złamana jest symetria inwersji krystalicznej;
3. poddanej naprężeniu cienkiej warstwy szarej cyny α -Sn, która również pod wpływem pola magnetycznego powinna przekształcić się z półmetal Diraca w półmetal Weyla.

W rozdziale 2 opisano stosowane techniki syntezy i przygotowania próbek oraz stosowaną aparaturę pomiarową. Ciekawe dla czytelnika są umieszczone zdjęcia sond i próbek z nałożonymi kontaktami, co pozwala docenić zręczność i precyzję konieczną do przygotowania próbek i przeprowadzenia pomiarów. W części wprowadzającej rozprawy, którą stanowią rozdziały 1 i 2, zabrakło mi omówienia struktury krystalicznej badanych materiałów oraz omówienia wyników literaturowych, dotyczących aktualnego stanu wiedzy na temat własności elektronowych i topologicznych prezentowanych w dalszej części materiałów. Zawarte w kolejnym rozdziale publikacje, nie będące pracami przeglądowymi, nie zawierają tych informacji, a pozwalałoby to na umiejscowienie wyników w szerszym kontekście.

Rozdział 3 zawiera opublikowane prace, z czego dwie pierwsze są w formie finalnej publikacji w czasopiśmie a trzecia w formie manuskryptu przyjętego do druku, ostatecznie trzecia publikacja ukazała się 26.06.2024 po złożeniu rozprawy doktorskiej przez Autora. Wszystkie prace powstały we współpracy międzynarodowej i są opublikowane w bardzo dobrych czasopiśmie (Journal of Physics and Chemistry of Solids oraz Physical Review B), gdzie musiały pomyślnie przejść wnikliwy proces recenzji. Zaświadcza to o ich merytorycznej poprawności oraz znaczącym wkładzie w rozwój dziedziny badań nad fizyką materiałów topologicznych. Zgodnie z oświadczeniami Autora i Współautorów, zasadniczym wkładem doktoranta w publikacje było wykonanie i przeanalizowanie pomiarów oporności i termosily w różnych konfiguracjach, przygotowanie odpowiednich rysunków oraz redakcja tekstu manuskryptów, pod opieką promotora i we

współpracy z pozostałymi autorami. Doktorant jest pierwszym autorem prezentowanych prac.

Pierwsza publikacja pt.: "Temperature-driven spin-zero effect in TaAs₂", (autorzy: Md. Shahin Alam, P.K. Tanwar, Krzysztof Dybko, Ashutosh S. Wadge, Przemysław Iwanowski, Andrzej Wiśniewski, Marcin Matusiak) skupia się na obserwacji zanikającej częstości podstawowej w oscylacjach kwantowych (tzw. spin-zero effect) wraz ze wzrostem temperatury, widocznej przede wszystkim w sygnale efektu Nernsta. Anomalią jest tu wyzwolenie tego efektu w funkcji temperatury przy zachowanej geometrii pomiarowej. Autorzy tłumaczą to temperaturową zmianą czynnika Landego, stawiając m.in. hipotezę, że wywołana jest temperaturowymi zmianami w sprzężeniu spin-orbita (SOC). Hipoteza ta jest bardzo ciekawa i chciałbym tutaj zapytać doktoranta czy może rozwinąć ją od strony mikroskopowej - jaka zmiana w strukturze elektronowej materiału mogłaby odpowiadać za temperaturowe zmiany w SOC? Czy doktorant może zaproponować jakieś komplementarne pomiary, które pozwoliłyby naświetlić tę hipotezę? Czy w funkcji temperatury dochodzi w TaAs₂ np. do zmian w geometrii układu bądź w rozkładzie gęstości elektronowych, które mogłyby wpłynąć np. na gradient potencjału efektywnego, od którego zależy SOC? Czy badania nad tym efektem były kontynuowane przez zespół bądź inne grupy po ukazaniu się publikacji? Ponadto, we wprowadzeniu powinna być się znaleźć dyskusja struktury elektronowej TaAs₂ (na podstawie wyników literaturowych), aby pokazać, że jest to faktycznie półmetal Diraca (publikacja tego nie zawiera).

Druga publikacja pt.: "Sign change of anomalous Hall effect and anomalous Nernst effect in the Weyl semimetal CeAlSi" (autorzy: Md Shahin Alam, Amar Fakhredine, Mujeeb Ahmad, P. K. Tanwar, Hung-Yu Yang, Fazel Tafti, Giuseppe Cuono, Rajibul Islam, Bahadur Singh, Artem Lynnyk, Carmine Autieri, Marcin Matusiak) dotyczy badań nad intrygującym materiałem, który łączy w sobie fizykę układów silnie skorelowanych (obecność ceru), magnetyzm, niecentrosymetryczność i topologię, tak więc stanowi niezwykle ciekawy obiekt do badań właściwości fizycznych. Przeprowadzone przez Doktoranta pomiary własności transportowych pokazały różne znaki anomalous efektu Halla w zależności od kierunku pola magnetycznego względem osi 'c'. Wykazano korelację tego efektu z kierunkiem namagnesowania, którego zmiana wywołuje rekonstrukcję struktury pasmowej. Ponadto, zaproponowano model który jakościowo tłumaczy również temperaturową zmianę obserwowanych sygnałów anomalous efektów Halla i Nernsta w fazie paramagnetycznej. Ma to wynikać z dużej krzywizny Berry'ego i obecności punktu Weyla w odległości 20 meV od energii Fermiego. Mam tutaj kilka pytań. Suplement do pracy zawiera rysunek S3 z pomiarami magnetyzacji, który nie jest omawiany w

tekście publikacji, ani w rozprawie. Jaką wartość ma zmierzony moment magnetyczny na atom ceru w fazie ferromagnetycznej? Jaka jest wartość momentu z dopasowania prawa Curie-Weissa oraz jak to wypada w porównaniu z momentem magnetycznym o wartości około $0.9 \mu_B$ obliczonym przy pomocy DFT? Na rys. 6 pokazano struktury pasmowe materiału dla różnych ustawień momentów magnetycznych. Na rysunkach tych nie widać obecności punktów Weyla (?) Obliczone pasma zaprezentowano jako linie, co generuje problem arbitralnego łączenia punktów w pasma i może spowodować usunięcie przecięć pasm i punktów Diraca/Weyla, czy mamy tutaj z tym do czynienia? Ponadto, do wyjaśnienia obserwowanych efektów w modelu Autorzy założyli pewien przebieg krzywizny Berry'ego (rys. S4), czy były jakieś przesłanki *a priori* do akurat takiego wyboru zaprezentowanego kształtu?

Trzecia publikacja z rozprawy, pt.: "Quantum transport properties of the topological Dirac semimetal α -Sn" (autorzy: Md Shahin Alam, Alexandr Kazakov, Mujeeb Ahmad, Rajibul Islam, Fei Xue, Marcin Matusiak) dotyczy badań topologicznych własności cienkiej warstwy szarej cyny. Materiał ten staje się półmetalem Diraca pod wpływem niewielkiego odkształcenia sieci krystalicznej po napyleniu cyny na podłoże o nieznacznie niedopasowanej stałej sieci. Pod wpływem pola magnetycznego półmetal Diraca staje się półmetalem Weyla. Pomiary oporności i termosiły oraz ich analiza, wykonane przez Doktoranta, pozwoliły powiązać postulowane własności topologiczne z obserwowanymi doświadczalnie efektami. W szczególności, obserwacja ujemnej podłużnej magnetooporności jest spójna z istnieniem dwóch punktów Weyla o różnej chiralności i występowaniem anomalnego prądu pomiędzy nimi. Zaobserwowano i wyjaśniono również zanikanie tego efektu w funkcji temperatury, analizując odpowiednie czasy rozpraszania. Cała analiza spójnie i elegancko dowodzi występowania punktów Weyla i chiralnej anomalii. Mam tu pytanie do "nietopologicznej" części pracy. W początkowej jej części Autorzy dość dużo uwagi poświęcili analizie "zwykłej" termosiły, spekulując m.in. czy dodatni wkład do termosiły pochodzi od transportu dziur czy od tzw. efektu "phonon drag". Zastanawia mnie czy w literaturze zależność temperaturowa termosiły szarej cyny nie została wcześniej opisana? Czy uzyskane wyniki dla warstwy różnią się od tych dla kryształu objętościowego i czy wykonano obliczenia termosiły "objętościowej" przy pomocy metod DFT?

Od strony redakcyjnej i językowej rozprawa prezentuje dobry poziom. Zawiera staranie wykonane i czytelne rysunki. Błędów językowych znalazłem niewiele. Na stronie 32 Autor prawdopodobnie nie usunął części korygowanego zdania "has installed five copper discs five copper disks are installed".

Z pozostałej aktywności naukowej Doktoranta wspomnieć należy, że wyniki swoich badań, zrealizowanych przy przygotowaniu rozprawy doktorskiej, Autor prezentował na 3 konferencjach, ponadto jest współautorem dwóch innych prac, nie wchodzących w cykl rozprawy. Otrzymał również nagrodę na konferencji półprzewodnikowej w Jaszowcu w 2023 roku. Dowodzi to znaczącej aktywności naukowej doktoranta oraz bardzo dobrego odbioru jego pracy w środowisku.

Podsumowując recenzję stwierdzam, że rozprawa doktorska Pana Md Shahina Alama stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. Cele postawione w rozprawie, w szczególności dotyczące zbadania własności transportowych trzech wybranych materiałów i powiązania ich z własnościami topologicznymi charakterystycznymi dla półmetali Weyla zostały niewątpliwie osiągnięte. Rozprawa prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną i umiejętności doświadczalne doktoranta w dyscyplinie nauk fizycznych, dowodzi umiejętności samodzielnego prowadzenia badań naukowych. Z tego względu rekomenduję przyjęcie rozprawy doktorskiej i dopuszczenie Pana MSc. Md Shahina Alama do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora.



Sekretariat Rady Naukowej
Instytut Fizyki PAN

Wpłynęło30.9.2024.....