

Warszawa, dn. 29 listopada 2023 r.

Dr hab. Sławomir Paweł Łepkowski (prof. IWC PAN)

Instytut Wysokich Ciśnień

Polska Akademia Nauk

ul. Sokołowska 29/37, Warszawa

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Nguyena Minha Nguyena pod tytułem  
„Topological and non-topological boundary states in SnTe and HgTe materials”**

Rozprawa doktorska mgr. Nguyena Minha Nguyena pt. „Topologiczne i nietopologiczne stany brzegowe w materiałach SnTe i HgTe” zawiera kompleksowe badania teoretyczne własności elektronowych nanodrutów zbudowanych z SnTe oraz dwuwymiarowych heterostruktur HgTe/CdTe, HgS/CdTe i InAs/GaSb/AlSb. Wszystkie te materiały należą do grupy tzw. materiałów topologicznych, charakteryzujących się nietypową strukturą stanów elektronowych, do opisu której stosuje się pojęcia matematyczne zaczerpnięte z topologii. Badania materiałów topologicznych, zapoczątkowane odkryciem całkowitego kwantowego efektu Halla, rozwinęły się szczególnie w ostatnim dwudziestolecu głównie dzięki pracom nad izolatorami, półmetalami i nadprzewodnikami topologicznymi. W ten szeroki i obecnie bardzo popularny kierunek rozwoju fizyki ciała stałego wpisuje się ta rozprawa. Doktorant przedstawił w niej dwa ambitne zagadnienia naukowe. Pierwszym z nich jest odkrycie topologicznych faz i związanych z nimi stanów brzegowych w nanodrutach zbudowanych z SnTe, w obecności pola magnetycznego i nadprzewodnictwa. Drugim tematem jest znalezienie mikroskopowej przyczyny powstawania nietopologicznych stanów krawędziowych, zaburzających kwantowy spinowy efekt Halla w planarnych heterostrukturach HgTe/CdTe, HgS/CdTe i InAs/GaSb/AlSb. Oba te zagadnienia dotyczą aktualnych i ważnych problemów dla dalszego rozwoju materiałów topologicznych. Nie ulega również wątpliwości, że te dwa tematy badawcze są trudne i ich opracowanie wymagało od doktoranta zarówno umiejętności posługiwania się skomplikowanym warsztatem matematycznym służącym do opisu własności topologicznych materiałów, jak i prowadzenia zaawansowanych obliczeń numerycznych struktury pasmowej jedno- i dwuwymiarowych układów. Praca doktoranta nad tymi zagadnieniami pod kierunkiem obu promotorów doprowadziła do otrzymania ważnych wyników, wnoszących istotny wkład w rozwój topologicznych struktur kwantowych, które zostały opublikowane w dwóch artykułach naukowych w prestiżowym czasopiśmie Physical Review B.

Rozprawa doktorska składa się z dwóch części poprzedzonych rozdziałem wstępnym i zakończonych podsumowaniem. Rozdział wstępny zatytułowany „Motywacja” zawiera krótkie wprowadzenie do materiałów topologicznych oraz uzasadnienie podjętych badań

naukowych nad stanami topologicznymi w nanodrutach SnTe i studniach kwantowych HgTe/CdTe i InAs/GaSb/AlSb. Autor zwięźle przedstawił różne rodzaje materiałów topologicznych, koncentrując się na krystalicznych izolatorach topologicznych, do których należy SnTe oraz na kwantowych spinowych izolatorach Halla odkrytych i badanych w heterostrukturach HgTe/CdTe i InAs/GaSb/AlSb. Z omówionego rozwoju badań nad tymi materiałami jasno wynika, że tematy podjęte w rozprawie są głęboko uzasadnione i bardzo aktualne. Przedstawiając historię odkryć izolatorów topologicznych, na stronie pierwszej, autor popełnił dwa błędy. Odkrycie trójwymiarowych izolatorów topologicznych zostało błędnie przypisane do pracy Hasana i Kane'a z 2010 roku, natomiast za odkrycie dwuwymiarowych izolatorów topologicznych została uznana praca autorstwa Qi i Zhanga z 2011 roku. (Obie te prace mają podwójne numery w bibliografii umieszczonej na końcu rozprawy. Niestety, podwójna numeracja w bibliografii dotyczy większej ilości artykułów.) W rzeczywistości dwuwymiarowe izolatory topologiczne zostały odkryte dzięki pracom teoretycznym Kane'a i Mele'a oraz Bernevig, Hughesa i Zhanga z lat 2005 i 2006 i zostały potwierdzone eksperymentalnie w studniach kwantowych HgTe/HgCdTe przez Königa i współpracowników w 2007 roku. (Autor wspominał o tych pracach przy okazji omawiania kwantowego spinowego efektu Halla.) Z kolei, trójwymiarowe izolatory topologiczne zostały przewidziane teoretycznie przez Fu, Kane'a i Mele'a oraz przez Moore'a i Balentsa w 2007 roku i zostały eksperymentalnie potwierdzone w stopach BiSb przez Hsieha i współpracowników w 2008 roku.

Pierwsza część rozprawy, złożona z rozdziałów od pierwszego do czwartego, stanowi gruntowne wprowadzenie w tematykę materiałów topologicznych. Ukazuje ona fundament wiedzy, na której doktorant oparł swoje własne badania naukowe. Rozdział pierwszy zatytułowany „Silne izolatory i nadprzewodniki topologiczne” rozpoczyna się od omówienia nieprzestrzennych symetrii hamiltonianów, czyli symetrii odwrócenia czasu, symetrii cząstkadziura i symetrii chiralnej oraz kanonicznych klas symetrii Altlanda-Zirnbauera, dla których przedstawiono klasyfikację stanów topologicznych w układach o różnej wymiarowości. Następnie są przedstawione dwa modele dwuwymiarowych izolatorów topologicznych: model Qi-Wu-Zhanga, opisujący kwantowy anomalny efekt Halla i model Bernevig-Hughesa-Zhanga, opisujący kwantowy spinowy efekt Halla. Dla obu modeli zostały podane indeksy topologiczne, czyli liczba Cherna dla modelu Qi-Wu-Zhanga i niezmiennik topologiczny  $Z_2$  dla modelu Bernevig-Hughesa-Zhanga. Używając tych indeksów topologicznych wyznaczono topologiczne diagramy fazowe oraz podano przykładowe struktury pasmowe dla różnych faz topologicznych. W dalszej części rozdziału pierwszego został przedstawiony model Kitaeva opisujący jednowymiarowy topologiczny nadprzewodnik. Wykorzystując podejście Bogoliubova-de Gennesa, wyznaczono niezmiennik topologiczny dla tego systemu i przeprowadzono obliczenia diagramu fazowego. Dla fazy topologicznie nietrywialnej, w układzie o otwartych brzegach otrzymano niesparowane stany Majorany o zerowej energii.

Rozdział drugi poświęcony jest krystalicznym izolatorom topologicznym. Najpierw omówiono klasyfikację materiałów topologicznych posiadających symetrie odbicia, ze szczególnym uwzględnieniem krystalicznych izolatorów i nadprzewodników topologicznych.

W dalszej części rozdziału zajęto się objętościowym kryształem SnTe, który jest krystalicznym izolatorem topologicznym, chronionym przez symetrie odbicia względem płaszczyzn zwierciadlanych (110) i (1-10). Używając hamiltonianu ciasnego wiązania, przedstawiono lustrzaną liczbę Cherna, jako niezmiennik topologiczny dla tego materiału oraz wyznaczono topologiczny diagram fazowy. Dla fazy krystalicznego izolatora topologicznego pokazano istnienie powierzchniowych stożków Diraca na płaszczyznach (001), zgodnie z zasadą korespondencji między objętością i brzegiem dla tych materiałów.

W rozdziale trzecim, zatytułowanym „Bezprzerwowe fazy topologiczne”, omówiono najpierw klasyfikację stabilnych powierzchni Fermiego, chronionych przez nieprzestrzenne symetrie Altlanda-Zirnbauera, a następnie przedstawiono dwa przykłady bezprzerwowych materiałów topologicznych: dwuwymiarowy węzłowy nadprzewodnik oraz trójwymiarowy półmetal Weyla. Dla obu materiałów podano odpowiednie niezmienniki topologiczne i pokazano wyniki obliczeń struktur pasmowych zawierających topologicznie chronione stany brzegowe.

Rozdział czwarty poświęcony jest topologicznym fazom wyższych rzędów. Używając uogólnionej zasady korespondencji między objętością i brzegiem układu, zdefiniowano fazy topologiczne  $n$ -tego rzędu. Następnie rozważono dwuwymiarowy nadprzewodnik w topologicznej fazie drugiego rzędu, charakteryzującej się obecnością pary narożnych stanów Majorany o zerowej energii.

Podsumowując pierwszą część rozprawy można stwierdzić, iż doktorant poprawnie omówił własności elektronowe podstawowych rodzajów materiałów topologicznych, poczynawszy od silnych izolatorów i nadprzewodników topologicznych, poprzez krystaliczne izolatory topologiczne, bezprzerwowe nadprzewodniki i półmetale, a kończąc na fazach topologicznych wyższych rzędów. Dla poszczególnych materiałów przedstawiono niezmienniki topologiczne, wyliczono diagramy fazowe i struktury pasmowe dla topologicznych faz. Wadą tej części pracy są dość liczne, ale drobne błędy i niejasności, które można było łatwo wyeliminować poprzez wykonanie uważnej korekty końcowej przed złożeniem rozprawy. Ponadto, tekst w wielu miejscach jest niedopracowany stylistycznie, ze sporą ilością błędów językowych. W tej recenzji skupiam się na błędach merytorycznych i przedstawiam poniżej listę fragmentów pierwszej części rozprawy, które wymagają korekty bądź wyjaśnienia.

- 1) Na stronie 6, we wzorach (1.1), druga macierz Pauliego jest pomnożona przez (-1).
- 2) Na stronie 16, na rysunkach 1.4 (c)-(d), widać niewielkie fluktuacje przerwy energetycznej w pobliżu topologicznego przejścia fazowego. Brakuje wyjaśnienia co jest przyczyną tych fluktuacji.
- 3) Na stronie 17 znajduje się odniesienie do rysunku 1.2 (d), którego nie ma w rozprawie.
- 4) Na stronie 24, poniżej wzoru (2.6), wymieniono klasę AIII jako klasę nieposiadającą symetrii chiralnej, co nie zgadza się z tabelą 1.1.
- 5) Na stronie 25, w linii 5, użyto niejasnego sformułowania „lustrzane liczby Cherna  $MZ_2$ ”.

- 6) Na stronie 25, w linii 20, błędnie użyto skrótu „TCIs” w wyrażeniu „które istnieją na dowolnej granicy TCIs i TSCs”. W tym wyrażeniu powinno być „TIs” zamiast „TCIs”.
- 7) Na stronie 28, na rysunku 2.2 (a), przedstawiono przerwę energetyczną dzieloną przez parametr  $t_{12}$  w funkcji ilorazu parametrów  $t_{11}$  i  $t_{12}$ . Brakuje wyjaśnienia dlaczego w przerwa energetyczna przyjmuje niezerowe wartości podczas topologicznego przejścia fazowego.
- 8) Na stronie 32 autor najpierw stwierdza, że  $d_{FS}=0$  dla półmetal Weyla, a w kolejnym zdaniu pisze, że  $d_{FS}$  jest zawsze dodatnie. Poprawne jest zdanie, że  $d_{FS}$  jest zawsze nieujemne.
- 9) Na stronie 33, we wzorze (3.2), przy symbolu  $H'$  znajduje się wyrażenie  $k_y=0$ , co wymaga wyjaśnienia. Poza tym prawe strony wzorów (3.2) i (3.3) są takie same, więc hamiltoniany  $H(\mathbf{k})$  i  $H'(\mathbf{k})$  są identyczne, co z kolei sprawia trudności w zrozumieniu wzoru (3.5). Dodatkowo, sformułowanie „Hamiltonian (3.4)” użyte przez autora, jest niejasne, bo wzór (3.4) opisuje indeks topologiczny.
- 10) Na stronie 39 autor błędnie stwierdza, że konwencjonalna zasada korespondencji między d-wymiarową objętością i (d-1)-wymiarowym brzegiem stosuje się tylko do krystalicznych izolatorów topologicznych, a nie do silnych izolatorów topologicznych.

Druga część rozprawy, złożona z rozdziałów piątego i szóstego, zawiera opis dwóch własnych prac badawczych doktoranta. Każdy z tych rozdziałów składa się z krótkiego streszczenia, artykułu opublikowanego w czasopiśmie Physical Review B oraz oświadczeń autorów, z których wynika jednoznacznie, iż wkład mgr. Nguyena Minha Nguyena w powstanie artykułu był zasadniczy. Rozdział piąty zatytułowany „Stany narożne, stany zawiasowe i mody Majorany w nanodrutach SnTe” zawiera artykuł autorstwa doktoranta i obu promotorów pod tym samym tytułem, w którym przedstawiono kompleksowe badania topologicznych faz kwantowy powstających w nanodrutach zbudowanych z SnTe, w obecności pola magnetycznego i nadprzewodnictwa. Obliczenia stanów kwantowych w nanodrutach były prowadzone przy użyciu metody ciasnego wiązania, opisaną w sekcji II i dodatku A. W sekcji III omówiono cztery fazy topologiczne powstające w nanodrutach o różnej grubości w obecności pola magnetycznego Zeemana, tj. : (a) trywialny izolator, (b) jednowymiarowy półmetal Weyla charakteryzujący się zlokalizowanymi stanami zawiasowymi, (c) izolator z odwróconą strukturą pasmową posiadający nietrywialną teksturę spinową i narożne stany brzegowe, (d) skośny półmetal nieposiadający narożnych stanów brzegowych. Sekcja IV poświęcona jest stanom zawiasowym i narożnym w układach jedno- i dwuwymiarowych, które istnieją dzięki nietrywialnej topologii wyższego rzędu. Dla hamiltonianu dwuwymiarowego odkryto niezmiennik topologiczny  $Z_2$ , precyzyjnie określający powstawanie stanów narożnych. Sekcja V dotyczy stanów Majorany, powstających w nanodrutach SnTe w obecności nadprzewodnictwa typu s. Stosując podejście Bogoliubova-de Gennesa, autorzy artykułu wykonali obliczenia numeryczne oraz przeprowadzili teoretyczną analizę własności topologicznych układu, z których jasno wynika że w nanodrutach zbudowanych z SnTe mogą istnieć objętościowe mody Majorany gdy zachowana jest symetria inwersji, a w przypadku złamania tej symetrii można uzyskać na końcach nanodrutów chronione topologicznie stany Majorany o zerowej energii.

Rozdział szósty zawiera artykuł pt. „Niechronione stany krawędziowe w materiałach kandydujących na kwantowy spinowy izolator Halla”, którego autorami, obok doktoranta i promotorów, są trzy osoby, tj. Giuseppe Cuano, Rajibul Islam i Carmine Autieri, zajmujące się obliczeniami *ab-initio* struktury pasmowej materiałów topologicznych. Głównym tematem tego artykułu jest zbadanie mikroskopowej przyczyny powstawania nietopologicznych stanów krawędziowych w heterostrukturach HgTe/CdTe, HgS/CdTe i InAs/GaSb/AlSb. Te niechronione stany brzegowe mogą zaburzać kwantowy spinowy efekt Halla i dlatego ich gruntowne zbadanie ma bardzo duże znaczenie dla rozwoju dwuwymiarowych izolatorów topologicznych, co zostało jasno przedstawione w sekcji I wspomnianego wyżej artykułu. Sekcja II zawiera opis modelu ciasnego wiązania użytego do obliczeń dwuwymiarowych stanów objętościowych i jednowymiarowych stanów brzegowych w badanych heterostrukturach. Parametryzację trójwymiarowych hamiltonianów ciasnego wiązania wykonano w oparciu o obliczenia struktury pasmowej stanów elektronowych dla objętościowych półprzewodników, przeprowadzone w ramach teorii funkcjonału gęstości. Na rysunkach o numerach od 3 do 5 pokazano wyraźnie istnienie nietopologicznych stanów krawędziowych w heterostrukturach HgTe/CdTe, HgS/CdTe i InAs/GaSb/AlSb. W sekcji III przedstawiony jest tzw. minimalny model badanych heterostruktur, który dzięki małej ilości parametrów umożliwia odkrycie ogólnych własności tych układów. Struktura pasmowa tego modelu zawiera płaskie pasma o nietrywialnych fazach geometrycznych Zaka, prowadzących do akumulacji ładunku elektrycznego na brzegach układu. W sekcjach IV i V pokazano na przykładzie heterostruktur HgS/CdTe, że nietopologiczne stany krawędziowe w tych układach pochodzą od płaskich pasm w modelu minimalnym i mogą być usunięte przez dodanie zewnętrznego potencjału elektrostatycznego na brzegu struktury.

Podsumowując drugą część rozprawy można z całą pewnością stwierdzić, iż przedstawione w niej wyniki stanowią istotny wkład w rozwój badań nad materiałami topologicznymi w skali światowej. Autor rozprawy opanował zaawansowany warsztat metod numerycznych i analitycznych służących do badania własności topologicznych struktur kwantowych. Na podkreślenie zasługuje jasny opis modeli teoretycznych i głęboka analiza otrzymanych wyników. Do tej części rozprawy mam jedną drobną uwagę krytyczną: w artykule prezentowanym w rozdziale szóstym, na stronie 6, w pierwszej kolumnie jest błędne odniesienie do rysunku 1(b), gdyż rysunku o takim numerze nie ma w tym artykule.

W moim przekonaniu przedstawiona rozprawa, zawiera nowe i ważne wyniki teoretyczne, wnoszące istotny wkład w rozwój topologicznych struktur kwantowych. Wyniki te zostały opublikowane w dwóch artykułach w prestiżowym czasopiśmie Physical Review B i nie ulega wątpliwości, że wkład doktoranta w powstanie tych publikacji był dominujący. Dlatego też, rozprawa ta zasługuje na wyróżnienie, pomimo dość licznych, lecz w gruncie rzeczy drobnych błędów występujących w jej pierwszej części. Szczególną zaletą tej rozprawy jest umiejętne połączenie zaawansowanych obliczeń numerycznych opartych na metodzie ciasnego wiązania i gruntownej analizy teoretycznej własności topologicznych badanych materiałów. Zastosowanie takiego podejścia zaowocowało otrzymaniem bardzo wartościowych i wiarygodnych wyników teoretycznych, które budzą zainteresowanie specjalistów na całym świecie.

Na koniec stwierdzam, że rozprawa mgr. Nguyena Minha Nguyena spełnia wszelkie wymogi stawiane rozprawom doktorskim określone w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. – „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” (Dz. U. z 2020 r. poz. 85, z późn. zm.) i wnioskuję do Rady Naukowej Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk o dopuszczenie mgr. Nguyena Minha Nguyena do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

*Sławomir Paweł Łepkowski*

Sławomir Paweł Łepkowski