



Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk

Mariana Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań

tel. 61 8695 100, 234, faks 61 8684 524

www.ifmpan.poznan.pl

Poznań, 31 lipca 2024 r.

prof. dr hab. Tomasz Toliński

Instytut Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu

Recenzja pracy doktorskiej pt. „Heat Transport by Topological Excitations” wykonanej przez mgr. Pardeepa Kumara

Przedstawiona mi do recenzji rozprawa doktorska mgr. Pardeepa Kumara została przygotowana w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie, w oddziale ON6 „Międzynarodowe Centrum Sprzężenia Magnetyzmu i Nadprzewodnictwa z Materią Topologiczną - MagTop”, pod kierunkiem dr. hab. Marcina Matusiaka, prof. IF PAN.

Rozprawa została przygotowana w języku angielskim, liczy 109 stron wraz z bibliografią oraz dwiema publikacjami Doktoranta stanowiącymi integralną część rozprawy. Obie prace zostały opublikowane w czasopiśmie Physical Review B (letter) i zgodnie z tytułem rozprawy dotyczą transportu ciepła poprzez wzbudzenia topologiczne. Praca z 2022 roku omawia zaobserwowane przez autorów silne odchylenia od prawa Wiedmanna-Franza w kryształach NbP, natomiast publikacja z 2023 roku przedstawia wyniki wskazujące na istotny wkład anomalii grawitacyjnej do przewodnictwa cieplnego w ferrimagnetycznym topologicznym semimetalu Weyla NdAlSi. Mgr Pardeep Kumar jest współautorem czterech innych publikacji, niestanowiących przedmiotu rozprawy, ale w podobnym obszarze tematycznym.

Zagadnienia, którymi Doktorant zajął się w ramach pracy doktorskiej są niezwykle ciekawe i w dużej mierze mają charakter nowatorski. Większość badań nad izolatorami i semimetalami topologicznymi opiera się na pomiarach przewodnictwa elektrycznego. Eksperymentalna charakterystyka przewodnictwa cieplnego i powiązanych efektów jest znacznie słabiej reprezentowana w literaturze. Wynika to z wyzwania, jakim jest przygotowanie pomiarów transportu ciepła na odpowiednim poziomie, jak i z trudności interpretacyjnych, wynikających z licznych mechanizmów wpływających na przewodnictwo cieplne. Stwierdzam, więc że tematyka podjęta przez Doktoranta jest zdecydowanie aktualna i ma szansę istotnie poszerzyć zrozumienie własności fizycznych materiałów topologicznych. Pozostaje ocena, w jakim stopniu Doktorantowi udało się osiągnąć założone cele, a stawia on je jednoznacznie w swojej dysertacji w formie następujących pytań:

1. Czy wzbudzenia topologiczne w semimetalu Weyla mogą przenosić ciepło, bez równoczesnego transportu ładunku?
2. Jak pole magnetyczne wpływa na topologiczne nośniki ciepła?
3. Czy fermiony Weyla spełniają prawo Wiedmanna-Franza?

Przed omówieniem uzyskanych wyników Doktorant zwyczajowo opisał podstawy teoretyczne badanych efektów (**Rozdział 1**), metodologię badań (**Rozdział 2**), a następnie załączył wspomniane publikacje poprzedzając je krótkim wstępem (**Rozdziały 3 i 4**). **Rozdział 5** to podsumowanie rozprawy doktorskiej. Praca zawiera również wymagane streszczenia, oświadczenia współautorów oraz spisy literatury i rysunków. Dysertacja została napisana w sposób poprawny i zrozumiały, zawiera pewne błędy edycyjne i językowe, których nie wymieniam w recenzji, z wyjątkiem tych, które mają znaczenie merytoryczne.

W **Rozdziale 1** mgr Pardeep Kumar w zwięzły sposób wyjaśnia podstawowe pojęcia z zakresu topologii, transportu elektronowego i cieplnego. Wprowadzenie to oceniam pozytywnie, choć można wskazać kilka nieścisłości:

- Na stronie 2 autor pisze, że: „The path integral of Berry curvature defines the Berry phase”. Jest to błędna definicja, ponieważ faza Berry’ego to całka po krzywej z potencjału wektorowego Berry’ego (zwanego również koneksją Berry’ego), co jest równoważne całce powierzchniowej z krzywizny Berry’ego.
- Doktorant niekonsekwentnie używa określenia „semimetal”, stosując czasami zapis „semi-metal”.
- Omawiając przewodnictwo cieplne i wzór 1.11 Doktorant nieprawidłowo stwierdza, że zgodnie z przybliżeniem Matthiesena czas relaksacji różnych efektów rozproszeniowych jest addytywny, w rzeczywistości reguła ta mówi raczej o addytywności szybkości relaksacji, czyli odwrotności czasów relaksacji.
- Kilukrotnie w rozprawie pojawia się określenie „electrical thermal conductivity”, sądzę że należy raczej mówić o „electronic thermal conductivity”.
- Na stronie 18 podane zostało kilka wzorów, relacji matematycznych bez numeracji.

Szczególnie ważnym elementem **Rozdziału 1** są punkty wprowadzające pojęcie kolektywnych wzbudzeń topologicznych, czyli stanowiących podstawę rozprawy chiralnego dźwięku zerowego (CZS – chiral-zero sound) oraz anomalii grawitacyjnej. Są to niezwykle ciekawe efekty pozwalające między innymi uniknąć problemów, które pojawiają się w badaniach przewodnictwa elektrycznego, np. można wykluczyć tzw. „current jetting effect”, ponieważ nie jest przykładane zewnętrzne pole elektryczne. CZS jest dźwięko-podobnym modem kolektywnym, tzw. oddychającym modem powierzchni Fermiego, możliwym tylko w obecności oddziaływań między kwazicząstkami. CZS nie występuje w typowych metalach, ale może pojawić się w semimetalach Weyla, a ponieważ wzbudzenia te propagują w antyfazie, to prąd ładunkowy zostaje zniesiony, a równocześnie możliwy jest transfer ciepła. Opis chiralnego dźwięku zerowego w punkcie 1.5.1 wyjaśnia kluczowe pojęcia, nie jest jednak w moim przekonaniu wystarczająco dopracowany. Na Rys. 1.5 ostatni (czerwone koło) punkt Weyla jest niepotrzebnie przesunięty. Doktorant wprowadza wzory 1.17 i 1.18 powołując się na publikację Songa i współautorów [120], formuły Doktoranta są jednak zmodyfikowane, więc wskazane byłoby odniesienie do szerszego materiału źródłowego, co umożliwiłoby ich weryfikację. Przykładowo poniżej wzoru 1.17 wprowadzona została średnia prędkość Fermiego jako pierwiastek kwadratowy z iloczynu trzech składowych, co wydaje się intuicyjnie

niepoprawne. Powyżej wzoru zdefiniowano ściślność i nawet jeśli jest oczywiste, że μ to potencjał chemiczny, powinno to zostać podane.

Punkt 1.5.2 wyjaśnia pojęcie anomalii grawitacyjnej, która w przypadku semimetali Weyla może odgrywać istotną rolę, jeśli wprowadzony zostanie gradient temperatury równoległy do przyłożonego pola magnetycznego i pojawi się różnica temperatur pomiędzy punktami Weyla o przeciwnej chiralności. Efekt ten został przedstawiony w sposób zrozumiały i dobrze zobrazowany graficznie.

W punkcie 1.6 Doktorant opisał swoją motywację podjęcia badań wzbudzeń topologicznych w semimetalach Weyla, w szczególności postawił konkretne, wspomniane już pytania, na które chciałby odpowiedzieć realizując swoje eksperymenty. Takie wyraźne i konstruktywne postawienie tez jest bardzo pomocne, autor nie wyjaśnia jednak jednoznacznie motywacji wyboru określonych związków do badań. Dlaczego dla NbP ogranicza się do CZS, a anomalie grawitacyjną bada tylko dla NdAlSi? NbP również wykazuje anomalie grawitacyjną, co opisano w pracy [4] z referencji podanych w artykule. Zauważalny jest również brak wstępnej prezentacji badanych związków, informacji o strukturze krystalograficznej, magnetycznej itp.

Część rozprawy doktorskiej dotyczącą wyników własnych Doktoranta rozpoczyna **Rozdział 2**, w którym opisana została metodologia badań. Jest to staranne opracowanie, zwróć więc uwagę tylko na wybrane elementy. Mgr Pardeep Kumar przedstawił szczegóły technologiczne dotyczące syntezy monokryształów, ich charakterystyki strukturalnej, opisał również układy pomiarowe, które wykorzystał do wyznaczenia właściwości transportowych, elektrycznych i cieplnych. W tym rozdziale można wymienić kilka nieścisłości:

- We wzorze 2.4 brakuje czynnika $\frac{1}{2}$.
- Wzór 2.6 nie opisuje oporności, ale napięcie Halla.
- W punkcie 2.5.3 pojawia się pewna niekonsekwencja symboli, czas relaksacji τ_{WP} był wcześniej oznaczony jako τ_{inter} (strona 12).

W kontekście technicznej, eksperymentalnej strony zrealizowanych badań na szczególne uznanie zasługuje skuteczne podjęcie wyzwania, jakim jest konstrukcja oryginalnego układu pomiarowego. Jest to obecnie rzadko podejmowana aktywność w związku z dostępnością urządzeń komercyjnych, a stanowi ryzyko związane z ewentualnym deficytem czasu na realizację samych badań. Doktorant z powodzeniem pogodził te dwa aspekty pracy naukowej.

Budowa układu pomiarowego została w detalach przedstawiona w punktach 2.6 i 2.7 oraz na zdjęciach 2.8 oraz 2.10. Zdjęcie 2.10 świetnie oddaje skalę trudności eksperymentu, w pełnym zrozumieniu przyjętych rozwiązań niewątpliwie pomógłby jednak dodatkowy rysunek schematyczny, poglądowy. Stanowiłby on również wsparcie dla wyjaśnienia wzoru 2.9 poprzez wskazanie charakterystycznych złączy i punktów, np. T_0 , T_1 i T_2 .

Powyżej Rys. 2.11 jest odwołanie do niego sugerujące, że pokazuje on odległość między kontaktami, przedstawia on jednak zależność napięcia od temperatury.

Doktorant przeprowadził rzetelną dyskusję możliwych strat ciepła w układzie, podając na stronie 47 rozwiązania zastosowane w celu redukcji tych strat. Wspomniany wcześniej, dodatkowy rysunek poglądowy stanowiłby dobre wsparcie dla czytelnika również w tym punkcie. Przykładowo ciekawym rozwiązaniem jest dodatkowy grzejnik służący redukcji strat ciepła poprzez radiację, ale nie jest on wskazany na zdjęciu.

Opis metodologii badań kończą punkty 2.7.2 i 2.7.3 wyjaśniające sposób wyliczania kluczowych parametrów w oparciu o analizę danych eksperymentalnych oraz punkt 2.8, w którym Doktorant racjonalnie podaje możliwe źródła błędów pomiarowych. Racjonalnie, ponieważ słusznie wskazuje, że głównym źródłem niepewności są czynniki geometryczne, mocowanie elektrod do kryształu o rozmiarach poniżej 2 mm jest niewątpliwie trudnym zadaniem. W punkcie 2.7.3 brakuje uzasadnienia dla dodania parametru c do przewodnictwa cieplnego, a dla równania 2.14 nie zostały objaśnione parametry pod pierwiastkiem.

Na kolejne dwa rozdziały składają się dwie publikacje poprzedzone krótkim streszczeniem. **Rozdział 3** dotyczy pracy zatytułowanej „Severe violation of the Wiedemann-Franz law in quantum oscillations of NbP”. Głównym rezultatem tych badań oraz ważnym i oryginalnym osiągnięciem Doktoranta jest zaobserwowanie oscylacji kwantowych z częstotliwościami zgodnymi z tymi, które uzyskano z pomiarów oscylacji Shubnikova – de Hassa (SdH), ale o przeciwnej fazie i dużej amplitudzie, której nie da się uzyskać w oparciu o prawo Wiedmanna-Franza. Doktorant wskazuje na istotną rolę wkładu CZS do przewodnictwa cieplnego i przytacza przekonujące argumenty uzasadniające wykluczenie innych potencjalnych przyczyn wzmocnienia przewodnictwa cieplnego. Wyklucza między innymi wkład ambipolarny. Warto tutaj wrócić do wprowadzenia teoretycznego (punkt 1.4.1.2), w którym Doktorant podaje, że znaczne wartości tego wkładu wymagałyby, aby kieszenie elektronowe i dziurowe były blisko siebie w przestrzeni pędów. Czy prowadzone wcześniej badania metodą ARPES wskazują na znaczną separację tych kieszeni dla NbP? Dlaczego Doktorant nie omawia, wspomnianego już w recenzji, wkładu anomalii grawitacyjnej dla NbP?

W treści publikacji, w pierwszym akapicie sekcji III zamiast odwołania do Rys. S1 powinno być odwołanie do Rys. S2.

Doktorant załączył do rozprawy doktorskiej oświadczenia współautorów o ich wkładzie do publikacji. W swoim oświadczeniu zadeklarował, że zajmował się przygotowaniem układu do pomiarów transportowych oraz ich przeprowadzeniem. Ponadto opracował oprogramowanie do analizy wyników, współpracował w interpretacji wyników i przygotowaniu publikacji. Jest to oświadczenie spójne z oświadczeniami pozostałych współautorów i pozwala ocenić wkład mgr. Pardeepa Kumara jako znaczący.

Na **Rozdział 4** składa się streszczenie, oświadczenia autorów publikacji oraz sama publikacja zatytułowana „Gravitational anomaly in the ferrimagnetic topological Weyl semimetal NdAlSi”. Deklarowany wkład Doktoranta obejmuje podobny zakres działań, jak w przypadku publikacji na temat NbP. Analiza własności transportowych semimetalu NdAlSi prowadzi Doktoranta do wniosku przeciwnego niż w przypadku NbP, mianowicie wnioskując, że prawo WF jest dobrze spełnione, tzn. wiąże anomalne wkłady do przewodnictwa elektrycznego i cieplnego, wynikające z obecności anomalii chiralnej. Anomalny wkład do przewodnictwa cieplnego, to tym razem anomalia grawitacyjna (choć podana w publikacji alternatywna nazwa „thermal chiral anomaly” wydaje się bardziej adekwatna i praktyczna). Wykazanie obecności tego wkładu jest kolejnym ważnym osiągnięciem Doktoranta, jednak zastosowana analiza wydaje się nieco karkołomna, wymaga uwzględnienia wielu wkładów do przewodnictwa cieplnego, takich jak przyczynek niezależny od pola magnetycznego, czy wkład związany z magnonami. Odwracając pytanie zadane w przypadku NbP dotyczące udziału anomalii grawitacyjnej, czy w przypadku NdAlSi może wносить swój wkład CZS?

W oparciu o rozprawę doktorską i załączone w jej ramach dwie publikacje można wymienić kilka najważniejszych osiągnięć naukowych mgr. Pardeepa Kumara:

1. W publikacji na temat krysztalu NbP zasadniczym osiągnięciem jest wyjaśnienie różnicy między amplitudą oscylacji kwantowych przewodnictwa cieplnego zmierzonego bezpośrednio, a amplitudą wyznaczoną z przewodnictwa elektrycznego poprzez odwołanie się do prawa Wiedmanna-Franza (WF). Doktorant wykazał w ten sposób, że w NbP zachodzi istotne naruszenie prawa WF, a wynika to z otwarcia się dodatkowego kanału przepływu ciepła poprzez generację chiralnego dźwięku zerowego (CZS). Badaniami nad NbP Doktorant odpowiedział pozytywnie na pierwsze z postawionych przez siebie pytań: „Czy wzbudzenia topologiczne w semimetalu Weyla mogą przenosić ciepło, bez równoczesnego transportu ładunku?”
2. Z kolei badania mgr. Pardeepa Kumara nad przewodnictwem cieplnym w krysztale NdAlSi są źródłem drugiego osiągnięcia, które polega na wyekstrahowaniu przyczynku do przewodnictwa od anomalii grawitacyjnej, czyli cieplnej anomalii chiralnej i pokazaniu, że anomalia ta wraz z bardziej znaną, elektryczną anomalią chiralną dobrze spełniają prawo WF. Badania te stanowią odpowiedź na trzecie pytanie postawione na wstępie przez Doktoranta: „Czy fermiony Weyla spełniają prawo Wiedmanna-Franza?” W pracy dotyczącej NdAlSi zawiera się także odpowiedź na drugie pytanie Doktoranta: „Jak pole magnetyczne wpływa na topologiczne nośniki ciepła?” W publikacji wskazuje on na aharmoniczne rozpraszanie fonon-fonon oraz na rozszczepienie przez pole magnetyczne stanu podstawowego momentu Nd^{3+} .
3. Trzecim, niebagatelnym osiągnięciem Doktoranta jest samo przygotowanie układu pomiarowego do badania przewodnictwa cieplnego.

Oceniając osiągnięcia mgr. Pardeepa Kumara należy dodać, że poza dwiema omawianymi publikacjami i współautorstwie w czterech innych, aktywnie upowszechniał swoje osiągnięcia. Zaprezentował plakaty na trzech konferencjach, a na jednej (APS meeting w USA) również wykład. Odbił miesięczny staż w ramach programu Erasmus+ w Instytucie Paula Scherrera.

Podsumowując, uważam że mgr Pardeep Kumar w trakcie realizacji doktoratu zdobył duże doświadczenie eksperymentalne oraz wykazał się odpowiednią wiedzą teoretyczną w zakresie prowadzonych badań. Pozwoliło mu to na postawienie oryginalnego problemu naukowego i jego zadawalające rozwiązanie w oparciu o własne badania naukowe. Tematyka pracy jest bardzo interesująca, a uzyskane wyniki wnoszą istotny i oryginalny wkład w dziedzinę badań nad materiałami topologicznymi. Recenzowana rozprawa doktorska nie jest wolna od błędów edycyjnych, a w recenzji wskazałem zagadnienia wymagające dyskusji lub korekty. Są to jednak głównie kwestie wpisujące się w typową dyskusję naukową i nie wpływają na moją końcową, pozytywną ocenę dokonań Doktoranta.

W związku z powyższym stwierdzam, że rozprawa doktorska Pana mgr. Pardeepa Kumara spełnia wszelkie warunki 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 wnoszę o dopuszczenie mgr. Pardeepa Kumara do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

T. To RWA