

prof. dr hab. Witold Bardyszewski
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski
ul. Pasteura 5, 00-681 Warszawa

Recenzja pracy doktorskiej mgr Shivy Safaei

**pt.: " The properties of the topological crystalline insulator surface states -
theoretical analysis"**

Przedmiotem rozprawy są teoretyczne badania własności elektronowych półprzewodnikowych związków IV-VI takich jak SnTe, PbTe, SnSe i PbSe oraz ich stopów, a w szczególności przejścia do nowej fazy topologicznej w tych materiałach.

Dla każdego fizyka zajmującego się materią skondensowaną jest jasne, że własności fizyczne ciał stałych mają swoje źródło we własnościach ich struktury pasmowej. Dotyczy to w szczególności symetrii pasm energetycznych, ale też jak się niedawno okazało, również ich struktury topologicznej. Do najciekawszych zjawisk związanych z topologią i symetrią pasm energetycznych należy występowanie tak zwanej fazy izolatora topologicznego (w skrócie TI), to jest stanu materii, w którym obok przerwy energetycznej w objętości materiału występują powierzchniowe stany metaliczne, chronione przez symetrię odwrócenia czasu. Zamknięcie się przerwy na powierzchni lub krawędzi izolatora topologicznego jest spowodowane nietrywialną topologią stanów objętościowych scharakteryzowanych przez nieznikające tzw. inwarianty topologiczne. W tym fascynującym świecie, w którym pojęcia matematyczne z zakresu topologii przeplatają się z własnościami fizycznymi realnych materiałów występują też inne zjawiska wynikające ze sprzężenia topologii i symetrii. Mam tu na myśli tzw. krystaliczne izolatory topologiczne (w skrócie TCI), w których stany powierzchniowe są chronione nie przez tę transformację odwrócenia czasu lecz przez symetrię kryształów. Zarówno izolatory topologiczne jak i krystaliczne izolatory topologiczne są ostatnio przedmiotem intensywnych badań w dziedzinie fizyki półprzewodników, czy fizyki materii skondensowanej w ogólności. Omawiana rozprawa wpisuje się ten obszar badań.

Rozprawa została napisana w języku angielskim, liczy 106 stron i zawiera 4 rozdziały oraz krótkie podsumowanie. Większość uzyskanych wyników została opublikowana we współautorskich artykułach wymienionych na początku rozprawy: trzy prace w Physical Review B, jedna w New Journal of Physics, oraz jedna w postaci preprintu.

Pierwsze trzy rozdziały mają charakter wprowadzenia i dotyczą podstawowych pojęć z zakresu fizyki izolatorów topologicznych oraz stosowanych metod teoretycznych. Nowe i oryginalne wyniki uzyskane przez mgr. S. Safaei są omówione w rozdziale 4 i w podsumowaniu.

W rozdziale pierwszym, czyli właściwie krótkim wstępie, przedstawiono koncepcję izolatorów topologicznych jako przykładu klasyfikacji materiałów na podstawie ich własności topologicznych. Nakreślono krótki rys historyczny poczynając od kwantowego efektu Halla, poprzez opis realizacji dwuwymiarowych TI w układach studni półprzewodnikowych, aż po przewidywania dotyczące nowego typu materiałów topologicznych jakimi są krystaliczne izolatory topologiczne. Przedstawiono też zakres materiału prezentowanego w rozprawie.

Rozdział drugi jest skonstruowany jak dobry (bo zwięzły) artykuł przeglądowy, który ma pomóc czytelnikowi w zrozumieniu wyników prezentowanych w dalszej części. Początkowo omówione są elementarne rzeczy dotyczące kwantowego efektu Halla i w jakimś sensie ta część wydaje się zbędna, ale w naturalny sposób prowadzi do podstawowej wielkości używanej przy charakteryzacji topologicznej pasm, a mianowicie koneksji Berry’ego dla stanów Blocha w kryształach. Następnie, pokazano jak koneksja Berry’ego może być wykorzystana do wyznaczenia jednego z podstawowych inwariantów topologicznych pasm w kwantowym efekcie Halla, tzw. inwariantu TKNN (Thouless-Kohomoto-Nightingale-den Nijs). W analogiczny sposób wprowadza się odpowiedni inwariant Z_2 dla spinowego efektu Halla w odniesieniu do polaryzacji spinowej. Wprowadzenie tej charakterystyki topologicznej, a konkretnie czterech indeksów Z_2 pozwoliło na ścisły podział wielu materiałów na różne klasy topologiczne. Wreszcie omówiono koncepcję krystalicznych izolatorów topologicznych, w których wykorzystuje się jeszcze jeden typ niezmiennika tzw. lustrzaną liczbę Cherna. Podano też wstępne informacje na temat własności kryształów klasy SnTe, które były już wcześniej badane w literaturze pod kątem możliwości występowania w nich fazy krystalicznego izolatora topologicznego.

Po tym dość rozbudowanym i ciekawie napisanym rozdziale następuje niezwykle lapidarny opis metod obliczeniowych zastosowanych w doktoracie (rozdział 3). Dowiadujemy się z niego, że do obliczeń zastosowano metodę ciasnego wiązania, która została dość elementarnie omówiona. Zaprezentowano też podstawowe idee leżące u podstaw wykonanych obliczeń typu ab initio, bez podania wszakże szczegółów. Stąd trudny do uwierzenia wniosek, że obliczenia tego typu są niezwykle łatwe.

Najciekawszy jest rozdział czwarty rozprawy, który jak już wspomniałem zawiera główne wyniki. Jest on logicznie podzielony na dwie części. Pierwsza część dotyczy stanów powierzchniowych w stopach $Pb_{1-x}Sn_xTe$ oraz $Pb_{1-x}Sn_xSe$, a druga poświęcona jest badaniu kwantowego spinowego efektu Halla w strukturach warstwowych z tych materiałów. Nawiązując do informacji przedstawionych w rozdziale 2 omówiono strukturę krystaliczną i

pasmową tellurku ołowiu i tellurku cyny. Oba materiały mają przerwę energetyczną zlokalizowaną w czterech punktach L strefy Brillouina, przy czym w przypadku SnTe mamy do czynienia z odwróceniem struktury w stosunku do PbTe. Na podstawie obliczeń pasmowych można stwierdzić, że w przypadku PbTe występuje gładkie przejście do granicy atomowej tzn. że pasmo przewodnictwa jest zbudowane głównie z orbitali kationowych (o wyższej energii) a pasmo walencyjne z orbitali anionowych, a więc jest to normalny izolator. Można zatem przypuszczać, że w stopach $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ o dostatecznie wysokiej zawartości cyny może nastąpić przejście do fazy krystalicznego izolatora topologicznego, tak jak to było zaproponowane w referencji [6] w odniesieniu do czystego SnTe. Nota bene, przedstawiony w pracy wykres struktury pasmowej SnTe (rys. 4.6d), choć jakościowo podobny do wykresu z pracy [6], różni się od niego w szczegółach. Być może jest to kwestia innej parametryzacji lub zbyt małej grubości płytki użytej w modelu numerycznym. Ostatecznego dowodu na istnienie fazy TCI dla $x > 0.38$ w $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ dostarczyła analiza stanów na powierzchniach (100), (110) i (111), która wykazała obecność tzw. stożków Diraca w okolicy odpowiadającej położeniu punktów L na przecięciu płaszczyzny symetrii zwierciadlanej przechodzącej przez te punkty i powierzchni kryształu. Jest to związane z tym, że stany te są chronione przez symetrię zwierciadlaną względem tej powierzchni. Z punktu widzenia ewentualnego potwierdzenia doświadczalnego istnienia stożków Diraca, bardzo ważna jest szczegółowa analiza polaryzacji spinowej stanów na badanych powierzchniach przedstawiona na zakończenie tego podrozdziału. W następnej części podobną analizę przeprowadzono dla stopów $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$, co wymagało dodatkowo wyznaczenia parametrów ciasnego wiązania dla kubicznego SnSe w drodze obliczeń metodą funkcjonału gęstości. W tym przypadku badano wpływ temperatury na przemianę fazową przy ustalonym składzie. Rola temperatura została uwzględniona przez renormalizację stałych sprzężenia ciasnego wiązania. Wykazano, że dla niezbyt wysokich $x \approx 0.27$, szacowane parametry ciasnego wiązania dość dobrze odtwarzają zależność przerwy energetycznej od temperatury. Zgodnie z zaprezentowanym modelem numerycznym, w niskiej temperaturze, $T = 80\text{K}$ na powierzchni (001) występują metaliczne stany powierzchniowe, natomiast w $T = 300\text{K}$ otwiera się przerwa energetyczna. Kształt powierzchniowej polaryzacji spinowej potwierdza istnienie fazy TCI w niskiej temperaturze.

Ostatnia część rozdziału czwartego zawiera najważniejsze wyniki rozprawy. Przedstawiono tutaj analizę stanów elektronowych w ultra cienkich warstwach, a więc w układach praktycznie dwuwymiarowych. Zbadano zarówno warstwy z $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ jak i z $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$. Okazało się, że dla pewnych grubości warstw układ przechodzi w stan odpowiadający kwantowemu efektowi Halla, w którym występują silnie spolaryzowane spinowo stany krawędziowe. Stwierdzenie to zostało bardzo dokładnie udokumentowane, poprzez wyznaczenie struktury pasmowej ultra cienkich warstw oraz zauważenie, że inwariant Z_2 dla tych struktur może

przyjmować wartość odpowiadającą nietrywialnemu izolatorowi. Ponadto zaprezentowane wykresy gęstości stanów na krawędzi tych warstw wyraźnie wykazują istnienie punktów Diraca oraz silnej polaryzacji spinowej. W przypadku warstw z $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ ma miejsce przekrycie przerw energetycznych w punktach $\bar{\Gamma}$ i \bar{M} , które może utrudniać eksperymentalną obserwację dyspersji stanów krawędziowych. Autorka przedstawiła realistyczną propozycję usunięcia tego problemu przez zastosowanie naprężenia dwuosiowego.

Na podstawie lektury rozprawy stwierdzam, że autorka opanowała zaawansowany warsztat techniczny i wykazała się dużą dojrzałością badawczą. Rozprawa dotyczy struktur zarówno trójwymiarowych jak i dwuwymiarowych, a obliczenia wymagały ogromnej precyzji. Dokonany przez mgr S. Safaei wybór metody ciasnego wiązania opartej na technice liniowej kombinacji orbitali atomowych wspomaganiej przez obliczenia ab initio w ramach teorii funkcjonału gęstości jest w pełni uzasadniony. Na podkreślenie zasługuje wnikliwa analiza otrzymanych wyników. Praca jest napisana bardzo starannie, ładnym językiem, a styl wykładu jest jasny, co powoduje, że czyta się ją z przyjemnością. Nie będę wymieniać drobnych i nielicznych błędów drukarskich. Jedynie chciałbym zwrócić uwagę na to, że w opisie rysunków 4.27 i 4.35 pomyloną lewą i prawą stronę.

W moim przekonaniu przedstawiona rozprawa zawiera oryginalne i istotne wyniki teoretyczne zasługujące na wyróżnienie. Wykazano bowiem w sposób niezbity, że tak zwane krystaliczne izolatory topologiczne takie jak $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ oraz $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ mogą w pewnych warunkach (ultra cienkie warstwy) przejść w stan “klasycznego” izolatora topologicznego. Na podkreślenie zasługuje staranność argumentacji stojącej za postawioną tezę.

Uważam w związku z tym, że rozprawa doktorska mgr Shivy Safaei spełnia wszelkie warunki niezbędne do dopuszczenia do publicznej obrony.

Warszawa, 11 lutego 2016 r.



prof. dr hab. Witold Bardyszewski