

Grodzisk Mazowiecki 8.01.2021 r.

Prof. Jakub Tworzydło
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski
ul. Pasteura 5, Warszawa

Recenzja rozprawy doktorskiej

magister inżynier Marty Agnieszki Brzezińskiej

pt. *"Beyond the ten-fold way: novel topological phases in low-dimensional systems"*

Przedstawiona do oceny rozprawa doktorska pani magister inżynier Marty Brzezińskiej jest bardzo obszerna, liczy bowiem aż 159 stron. Główny korpus pracy poprzedzają streszczenia w języku angielskim i polskim, rozprawa została też opatrzona spisem treści, pomocnym spisem stosowanych skrótów oraz spisem ilustracji i tabel. Dzieło to już przy pierwszym obcowaniu przynosi odczucie wybitnego, starannego i przygotowanego w sposób nad wyraz solidny. Pani Marta Brzezińska bardzo poważnie potraktowała wymagania stawiane obszernym pracom naukowym i pretenduje do ich celującego wypełnienia.

Obcowanie z manuskrytem jest przyjemne, gdyż autorka dołożyła wszelkich starań, aby strona edycyjna pracy była nienaganna. Podział na rozdziały i podrozdziały jest klarowny, rozkład tekstu dobrze zrównoważony, logiczne części pracy znajdują wyraźne i przejrzyste oznaczenie w formacie edycyjnym. W tak długim tekście bardzo pomocne są nagłówki na każdej stronie, zawierające tytuł rozdziału (strony parzyste) i tytuł podrozdziału (strony nieparzyste). Autorka włożyła zapewne wiele wysiłku, aby całość pracy była przygotowana w sposób jednolity pod względem redakcyjnym i edycyjnym. Jedyna moja drobna uwaga dotyczy numeracji wzorów: wydaje mi się bardziej logiczne, aby używać numeracji wewnątrz rozdziałów zamiast jednolitej przez cały manuskrypt. Nie widzę też potrzeby dodania stron nienumerowanych i nie występujących w spisie treści, oznaczających części I,

II i III. Praca jest też napisana bardzo dobrze od strony językowej, angielski pracy jest komunikatywny i dostosowany do wymagań prezentacji naukowej. Znakomite wrażenie robią wykresy i rysunki, które nie tylko są estetyczne, ale także bardzo czytelne i precyzyjnie ilustrują przedstawiane wyniki. Należy podkreślić unikanie przez autorkę epatowania kolorami: obszary oznaczane są w odcieniach pastelowych, a skale kolorowych map są zgodne z wymaganiami naukowej wizualizacji danych.

Pracę otwiera krótkie wprowadzenie, w którym autorka przedstawia w sposób syntetyczny obecny stan badań i rozumienia problematyki faz topologicznych. Wywód poprowadzony jest w sposób bardzo jasny, na tle całej dziedziny nakreślona też została motywacja podjęcia własnych badań. Autorka określa też główną myśl kolejnych rozdziałów pracy.

Rozdział 1. w całości poświęcony jest wprowadzeniu koniecznych pojęć z dziedziny badań kandydatki. Znajdujemy tutaj syntetyczne przedstawienie roli symetrii globalnych (tj. niezależnych od realizacji sieci krystalicznej: odwrócenia czasu, symetrii cząstka-dziura i symetrii chiralnej) w pasmowej teorii izolatorów i nadprzewodników topologicznych. Autorka wprowadza i wyjaśnia ważne pojęcie klas Altlanda-Zirnbauera, klasyfikacji popularnie nazywanej 10-krotną ścieżką, które stanowią punkt odniesienia dla dalszych rozważań. Omówione zostały najbardziej znane przykłady takich klas symetrii, które przy zadanej wymiarowości mogą być scharakteryzowane niezmiennikiem topologicznym. I tak, na przykładach konkretnych modeli, autorka wprowadziła: liczbę Cherna w modelu całkowitoliczbowego kwantowego efektu Halla, niezmiennik \mathbf{Z}_2 w modelu kwantowego spinowego efektu Halla (wg Kane-Melle) oraz liczbę nawinięć (indeks punktu, winding number) w modelu łańcucha Su-Schrieffera-Heegera. Oddzielnie omówiona została odpowiedniość między własnościami objętościowymi i brzegowymi (bulk-boundary correspondence), z podaniem dokładnej analizy odnośników literaturowych dla tego zagadnienia.

Autorka osiągnęła we wprowadzeniu dobry balans przywołanych faktów ze zwartością i dydaktycznością prowadzonej prezentacji. Wstęp zawiera podsumowanie nie tylko wyników podręcznikowych, ale także ich konieczne uzupełnienie na podstawie bieżących źródeł literaturowych. Wprowadzenie jest skrótowe z konieczności, stanowi jednak bardzo dobre i wyczerpujące przedstawienie pojęć używanych w dalszych badaniach. Rozdział 1 dobitnie dokumentuje biegłość autorki w poruszaniu się po niełatwej dziedzinie topologicznej teorii pasmowej i wykazuje, że autorka

osiągnęła głębokie zrozumienie koniecznego warsztatu teoretycznego.

Kolejne rozdziały pracy: 2, 3, 4 i 5 przedstawiają oryginalne wyniki badań autorki uzyskane w trakcie studiów doktoranckich. Kandydatka starannie podejmuje motywację prowadzonych badań na początku każdego z rozdziałów, co może sprawiać wrażenie pewnego powtarzania już wprowadzonego materiału (we wstępie), jest jednak zaletą dla czytelnika, który chciałby zapoznać się tylko z jednym wycinkiem badań autorki. W pewnym sensie niezależność rozdziałów wynika z oparcia ich na twórczych, oryginalnych pracach już opublikowanych w bardzo dobrych czasopismach. Myśl przewodnia łącząca fragmenty rozprawy jest jasna: polega na poszukiwaniu zjawisk wykraczających poza utarte szlaki teorii klasyfikacji 10-krotnej.

Zagadnienie postawione w **rozdziale 2.** ma na celu zbadanie możliwości przypisania własności topologicznych stanom elektronu w sieciach samopodobnych, scharakteryzowanych ułamkowym wymiarem, czyli na sieciach fraktalnych. Zagadnienie tak postawione jest bardzo ciekawe, i, jak wynika z badań autorki, nie jest jeszcze w pełni rozwiązane. Autorka identyfikuje problemem Hofstadtera, czyli wprowadza orbitalny efekt zewnętrznego pola magnetycznego na ogólnym grafie, by następnie dokładniej zbadać jego konsekwencje na przykładowych sieciach fraktalnych: trójkącie i dywanie Sierpińskiego. Wprowadzony we wstępie aparat pojęciowy klasyfikacji wg niezmienników topologicznych musi zostać uogólniony tak, aby mógł być zastosowany do układów nie posiadających symetrii translacyjnej. Dodatkowym wyzwaniem w geometrii fraktalnej jest brak wyraźnego podziału na własności objętościowe i powierzchniowe (powierzchnia może być dominująca), co utrudnia taką najprostszą identyfikację faz topologicznych, dostępną np. w układach z nieporządkiem. Autorka radzi sobie znakomicie z tak postawionym, niełatwym zadaniem, w rozdziale 2 przedstawia rozległą i pogłębioną analizę problemu.

Czytelnik śledzi trzy kryteria, które pomagają ustalić własności topologiczne modelu, w zależności od wybranych parametrów. Te kryteria to: identyfikacja stanów krawędziowych, zaproponowanie i obliczenie indeksów topologicznych, a na koniec badanie wpływu nieporządku na stabilność stanów.

Dokładna analiza jedno-elektronowej gęstości stanów, wspomagana przez obliczenie przestrzennie zależnego stosunku partycypacji (IPR) oraz zaproponowanego przez autorkę oznaczenia markera

lokalizacji stanów na krawędziach, prowadzi do zbieżnych wniosków. W obszarach diagramu fazowego energia-strumień autorce udaje się w ten sposób zidentyfikować stany krawędziowe występujące na kolejnych poziomach hierarchii fraktalnej.

Metodą najbardziej bezpośrednią, dostosowaną do układów nieperiodycznych, jest obliczenie tzw. indeksu Botta B , będącego odpowiednikiem liczby Cherna w sformułowaniu przestrzeni rzeczywistej. Indeks ten jest jednak dość trudny do wyznaczenia w praktycznych obliczeniach i pozwala badać stosunkowo niewielkie układy. Autorka wspomaga analizę własności topologicznych fraktalnego problemu Hofstadtera obliczając wielkość C , którą nazywa liczbą Cherna w sformułowaniu w przestrzeni położeń. Wydaje mi się, że bardziej precyzyjna, i zgodna z wynikami literatury, byłaby nazwa „marker Cherna” dla podkreślenia, że wielkość ta nie jest ściśle skwantowana (całkowitoliczbowa). Wielkość ta pozwala na prowadzenie obliczeń na większych sieciach, jednak pojawiają się problemy z otrzymaniem wyników bliskich liczbie całkowitej, przy numerycznie dostępnym skalowaniu z rozmiarem układu.

Analiza efektów uzyskiwanych w topologicznych sieciach fraktalnych przez dodanie nieporządku ma w zamiarze autorki na celu pomoc w identyfikacji odpowiednich faz. Wydaje się jednak, że zjawiska związane z nieporządkiem mogą same w sobie stanowić odrębne zagadnienie badawcze. Ważnym wstępnym wynikiem autorki jest to, że dokumentuje wyraźne cechy przejścia pomiędzy stanami rozciągniętymi a zlokalizowanymi na sieciach fraktalnych, jak również identyfikuje większą podatność faz trywialnych na przejście do zlokalizowanego stanu izolatora Andersona.

Nie ukrywam, że ten właśnie rozdział pracy autorki jest bardzo bliski moim zainteresowaniom badawczym. Wyniki uzyskane w jej pracy są niewątpliwie bardzo ciekawe, inspirujące i motywują do postawienia kolejnych pytań. Autorka nie rozstrzyga wszystkich wątpliwości dotyczących identyfikacji faz topologicznych na fraktalach, ale wskazuje nowe kierunki inspirujące do ciekawych, dalszych badań. Omawiany rozdział 2 jest oparty na artykule opublikowanym w *Physical Review B* (w roku 2018), gdzie p. Marta Brzezińska jest pierwszą współautorką, lista zawiera trzech autorów, a ostatnim z nich jest prof. Neupert, kopromotor jej doktoratu. Nie ulega wątpliwości, że p. Marta Brzezińska wniosła ważny wkład do naprawdę znakomitej pracy.

Rozdział 3. rozprawy przedstawia wyniki uzyskane przez autorkę podczas pracy w grupie prof. Arka Wójśa, opublikowane w artykułach w dobrych czasopismach *Physics Letters A* oraz *Journal of Physics: Condensed Matter*. Kandydatka jest pierwszą autorką jednego z tych artykułów, w drugim występuje w środku dłuższej listy autorów. W obu artykułach zasadniczą pracę wykonała pod opieką promotora pomocniczego dr hab. Pawła Potasza oraz swojego głównego promotora prof. Wójśa. Nie ulega wątpliwości, że treść tego rozdziału odzwierciedla dobrze postawione zadanie badawcze, które p. Marta Brzezińska rozwiązała w sposób kompetentny i poprawny.

Motywacją badań przedstawionych w tym rozdziale jest z jednej strony zastosowanie ogólnych idei teoretycznego opisu faz topologicznych do konkretnych, nowatorskich materiałów, z drugiej uzyskanie lepszego wglądu w klasyfikację topologiczną przez uwzględnienie roli pewnych symetrii sieci krystalicznej. Zaletą rozważanych materiałów, którymi są w tym rozdziale atomowo cienkie warstwy bizmutu i antymonu, jest ich stosunkowo prosta struktura, która jednak dopuszcza różne możliwości sterowania ich własnościami. Rozpatrywane są dwie konfiguracje: naturalna struktura materiału wyboczonego oraz atomowo płaska struktura tzw. bismutenu i antymonenu. Parametrami, których wpływ autorka modeluje i analizuje, są obecność zewnętrznego pola elektrycznego, naprężenie struktury, czy też użycie substratu z węgliku krzemu. W pierwszej części rozdziału analizowana jest też pojedyncza warstwa stopu bizmutowo-antymonowego w funkcji składu.

Jednym z ciekawych wniosków tej części badań jest znalezienie zakresu parametrów, w których możliwe jest przejście pomiędzy fazą krystalicznego izolatora topologicznego a fazą izolatora topologicznego opartego na niezmienniku \mathbf{Z}_2 (w analogii do modelu Kane-Mele opisanego we wstępie) posiadającego stosunkowo dużą przerwę energetyczną (0,9 eV dla bismutenu i 0,3 eV dla antymonenu). Drugim ciekawym wynikiem tego rozdziału jest użycie miary entropii splątania oraz spektrum splątania podukładów powstałych przez przecięcie podłużne w badanej konfiguracji nano-wstążki. Okazuje się, że pędowo-rozdzielcza analiza tych dość wyrafinowanych wskaźników dobrze odzwierciedla ochronę topologiczną, zarówno tę związaną z niezmiennikiem \mathbf{Z}_2 , jak też z symetrią zwierciadlaną w płaszczyźnie monowarstwy.

Wydaje się, że analiza wskaźników splątania w kontekście własności topologicznych nie jest całkiem oczywista, autorka odkrywa skok, lub też nieciągłość pochodnej entropii splątania, ale uzyskanie

systematycznych i ogólnych wyników na te wielkości wydaje się być dość trudne. Niepokoi mnie mało przekonujące skalowanie tych charakterystyk z rozmiarem układu np. na rys. 31 b) (wstawka) efekt nieciągłości wydaje się maleć z rozmiarem układu, jednak dane numeryczne nie są konkluzywne. Można w tym kontekście postawić pytanie, czy znane są wyniki ogólne, lub bardziej precyzyjne numeryczne, które pozwalają zidentyfikować przejście topologiczne (np. jedno z typowych z tabeli ścieżki 10-krotnej), czy też taki związek stanowi tylko pewną roboczą hipotezę?

Tym niemniej, wyniki badań przedstawione przez autorkę w rozdziale 3. są ciekawe i nieoczywiste, przeprowadzona została rozległa i wnikliwa analiza zgodna z wymaganiami zaawansowanych badań teoretycznych w tej dziedzinie. Uważam, że same wyniki badawcze rozdziału 3, wraz z wcześniejszym rozdziałem 2, a także wykazana we wstępie biegłość posługiwania się pojęciami z dziedziny niezmienników topologicznych w pasmowej teorii materiałów w zupełności wyczerpują ustawowe wymagania stawiane pracom doktorskim.

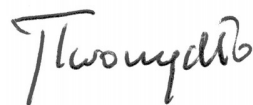
Autorka rozprawy wykazuje jednak dalej idącą ciekawość badawczą, oraz ma ambicję rozwoju na miarę istotnego gracza w swojej dziedzinie badań nauki. Dwa kolejne **rozdziały pracy 4. i 5.** zostały napisane w oparciu o bardzo rozległe prace teoretyczne, opublikowane w czasopiśmie Physical Review Research (IF zostanie opublikowany w czerwcu). Prace te spełniają w moim mniemaniu najwyższe standardy i dają istotny wkład do frontu badań teoretycznych. Pani Marta Brzezińska pracowała podczas ich powstawania w grupie prof. Neuperta i jest jedną spośród wielu autorów: 8-u w pracy z roku 2019 oraz 14-tu w przypadku późniejszej pracy z roku 2020. Wydaje mi się, że typ zaangażowania kandydatki w te zagadnienia badawcze ma nieco inny charakter, jest to zapewne wkład bardziej ekspercki i koncepcyjny. Pojawia się więc pewna trudność, aby wyróżnić konkretne zadanie badawcze, które zostało przez nią rozwiązane w ramach grupowych publikacji. Prezentacja wyników tych prac w rozprawie doktorskiej dokumentuje oczywiście pełną kompetencję, staranność i dojrzałość naukową pani Marty Brzezińskiej.

Warto też podkreślić, że przykład materiałów użytych w **rozdziale 4.** do ilustracji ogólnych koncepcji klasyfikacji stanów OAL (obstructed atomic limit, granica atomowa otrzymana z utrudnieniem (brak terminu polskiego)) bazuje na ekspertyzie kandydatki uzyskanej w ramach pracy nad rozdziałem 3. Wyniki ilustrujące powstawanie stanów narożnych w fazach OAL, wraz z diagramami fazowymi,

zostały obliczone w modelu monowarstwy bizmutu, antymonu i arsenu, i są zebrane syntetycznie na rysunku 44 (Figure 44). Badanie w funkcji parametru długości wyboczenia (wielkość wprowadzona wcześniej i odgrywająca istotną rolę w badaniach rozdziału 3) pozwala na uzyskanie w tych materiałach fazy krystalicznego izolatora topologicznego, dwóch różnych faz OAL oraz fazy izolatora typu Z_2 . Byłbym zatem wdzięczny, gdyby kandydatka zechciała na potrzeby obrony skomentować bardziej precyzyjnie swój twórczy wkład do wyników opisanych w rozdziale 4.

W niniejszej recenzji przywołałem i omówiłem bardziej szczegółowo tylko pewną część rezultatów naukowych kandydatki. Wskazuję też na jej szybki dalszy rozwój naukowy i uczestnictwo w badaniach prowadzonych przez wiodącą grupę prof. Neuperta na Uniwersytecie w Zurychu. Uważam, że całość rozprawy doktorskiej ukazuje wyraźnie sylwetkę kompletnej, kompetentnej i dojrzałej kandydatki do stopnia doktorskiego. Pani Marta Brzezińska poszukuje rozwiązań problemów stawianych zgodnie z najlepszymi standardami naukowymi, potrafi przeprowadzić ich rozległą i wnikliwą analizę, a także przekazać wyniki w logicznym, zwartym i ciekawym wywodzie naukowym.

Z przyjemnością stwierdzam, że przedstawiona do oceny praca spełnia z naddatkiem wszystkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane pracom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie jej autorki do dalszych etapów przewodu.



Grodzisk Mazowiecki, 8.01.2021 r.