

Kraków, 29.08.2022



UNIwersYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Marcina Kurzyny

Pan Marcin Kurzyna przygotował na Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie rozprawę doktorską pod kierunkiem dr. hab. Tomasza Kwapińskiego. Praca nosi tytuł „Własności elektryczne normalnych i topologicznych łańcuchów atomowych na różnych podłożach”, bazuje na 7 dwuautorskich publikacjach naukowych i jest teoretyczną analizą układów wspomnianych w tytule. Wkład Doktoranta w przygotowanie artykułów szacowany jest na 50%. Rozprawa zawiera znakomity autoreferat napisany ciekawie i świetnie wprowadzający czytelnika w tematykę podejmowaną w pracy. W autoreferacie opisany jest także autorski program komputerowy umożliwiający numeryczne symulacje zachowania łańcuchów atomowych w różnych warunkach. Po przeczytaniu autoreferatu czytelnik jest dobrze przygotowany do zapoznania się z głównymi wynikami rozprawy doktorskiej i z niecierpliwością tego wygląda.

W pierwszym artykule [J. Appl. Phys. **123**, 194301 (2018)] składającym się na rozprawę doktorską Pan Marcin Kurzyna bada transport w jednowymiarowym łańcuchu w kontakcie z różnymi podłożami oraz w obecności atomów zaburzających, które tworzą dodatkowy krótszy łańcuch. Analizowane są przypadki, w których główny łańcuch posiada lub nie posiada nietrywialne własności topologiczne. W reżimie nietrywialnym topologicznie, na brzegach łańcucha obecne są zlokalizowane stany brzegowe. Istnienie stanów brzegowych gwarantowane jest przez topologię, ale głębokość wnikań stanów (tzw. długość lokalizacji ξ) zmienia się z parametrami łańcucha – w modelu Su-Schrieffer-Hegger (SSH) zależy ona od stosunku amplitud tunelowań $\xi=1/\ln(V_2/V_1)$. Doktorant analizuje własności elektryczne konkludując, że w fazie nietrywialnej topologicznie szereg z nich nie jest czuła na obecność zaburzających atomów oraz nie zależy od własności podłoża. Najdłuższy rozpatrywany łańcuch zaburzających atomów rozciąga się od 10 oczka do 90 oczka głównego łańcucha złożonego z 100 atomów. Długość lokalizacji (dla $V_1=2$, $V_2=4$) jest rzędu $\xi=1.5$ oczka, a więc wygląda na to, że własności układu zdeterminowane przez stany brzegowe nie mają szansy na modyfikację przez atomy zaburzające, bo tych atomów w okolicy brzegów po prostu nie ma. Ciekawy jestem opinii Doktoranta czy jest to moja zbyt uproszczona obserwacja, czy też rzeczywiście niezależność pewnych własności łańcuchów w nietrywialnej fazie topologicznej na tym polega?

W drugim artykule [J. Appl. Phys. **125**, 144301 (2019)] rozważane są elektryczne własności jednowymiarowych łańcuchów atomowych i kwazi-jednowymiarowych wstążek atomowych z uwzględnieniem oddziaływań typu

Instytut

Fizyki Teoretycznej

Zakład Optyki Atomowej

ul. prof. Stanisława

Łojasiewicza 11

PL 30-348 Kraków

tel. +48(12) 664-47-79

e-mail:

krzysztof.sacha@uj.edu.pl

spin-orbita. Bazą do analizy układów jest prosty dwuatomowy model, który można w pełni opisać analitycznie i który znakomicie ilustruje jakiego zachowania możemy się spodziewać w rozważanych układach. Okazuje się, że lokalna gęstość stanów wykazuje asymetrię, jeśli atomy łańcuchów mają kontakt z podłożem zdelokalizowanych elektronów lub obecne są oddziaływania spin-orbita. Ponadto w obecności oddziaływań spin-orbita, gęstość stanów wykazuje zależność od spinu, ale tylko na końcach łańcuchów. Opisane wnioski dotyczą układów trywialnych topologicznie. Doktorant analizuje również model SSH z uwzględnieniem spinowych stopni swobody i w obecności oddziaływań spin-orbita. Zastanawiam się jakie własności topologiczne ma taki model, tzn. jaki jest niezmiennik topologiczny opisujący nietrywialne topologicznie fazy, ile stanów brzegowych może istnieć?

Podobne pytanie dotyczące własności topologicznych pozostaje aktualne w trzecim artykule [Phys. Rev. B **102**, 195429 (2020)], w przypadku dwóch łańcuchów SSH sprzężonych poprzez tunelowanie między sąsiednimi oczkami. Na rys.7 (Fig.7) pokazane są spektra energetyczne. Dlaczego nazywane są one kwazi-energiami? – nazewnictwo kwazi-energie zwykle stosuje się w odniesieniu do wartości własnych hamiltonianów Floquet w periodycznie napędzanych układach. W pewnych zakresach wartości parametru V_x widać obecność poziomów energetycznych w przerwach energetycznych – czy odpowiadające im stany własne są chronione topologicznie i jaki niezmiennik topologiczny odpowiada za nietrywialną fazę? Na rys.5 przedstawione jest tworzenie stanu brzegowego, gdy pojedynczy łańcuch przygotowany w fazie SSH1 zostaje rozerwany między oczkiem 8 i 9. Odpowiada to powstaniu dodatkowych brzegów w łańcuchu, a wokół tych brzegów formują się stany brzegowe. Moim zdaniem to czy uformują się stany brzegowe czy nie, zależy od miejsca rozerwania łańcucha. Jeśli łańcuch SSH1 rozerwiemy między oczkiem 7 i 8, stanów brzegowych nie będzie. Spodziewam się również, że rozerwanie w tym samym miejscu (tj. między oczkiem 7 i 8) łańcucha w trywialnej fazie topologicznej SSH0 spowoduje uformowanie stanów brzegowych.

Bardzo ciekawe analogie zaobserwował Pan Marcin Kurzyna w czwartej pracy [Phys. Rev. B **102**, 245414 (2020)], gdzie rozważał dwie kropki kwantowe. W chwili $t=0$ następuje włączenie sprzężenia między nimi i sprzężenia jednej z nich z zewnętrzną elektrodą. Układ zaczyna ewoluować i lokalna gęstość stanów wykazuje gasnące oscylacje w czasie. W równoodległych chwilach czasowych gęstość stanów posiada w funkcji energii podobną strukturę jak gęstość stanów łańcuchów o liczbie oczek M , gdzie wartość M rośnie liniowo z czasem. Zatem w pewnych chwilach czasowych dwie kropki kwantowe, z punktu widzenia gęstości stanów,

zachowują się jak struktura krystaliczna w przestrzeni. Tego typu zachowanie zostało bardzo trafnie, moim zdaniem, nazwane przez Doktoranta przejściowymi kryształami (ang. transient crystals). Pan Marcin Kurzyna sugeruje również, że jest to pewien rodzaj kryształów czasowych, ale tu nie bardzo jestem w stanie się zgodzić, chyba że w trakcie obrony Doktorant będzie w stanie mnie przekonać. Pan Marcin Kurzyna podkreśla, że w odkryciu kryształów przejściowych pomogła mu jego autorska technika wizualizacji danych polegająca na użyciu nie jednej, ale kilku kontrastujących ze sobą palet barw. Pozwala ona zauważyć małe zmiany badanych wielkości, które w standardowej wersji wizualizacji są zupełnie niewidoczne. Technika została szczegółowo opisana w pracy numer siedem [IEEE Computer Graphics and Applications **42**, 95 (2022)].

W piątej publikacji składającej się na rozprawę doktorską [Applied Sciences **11**, 772 (2021)] analizowane są tzw. pompy elektronowe w topologicznych łańcuchach z zaburzeniem zależnym od czasu. W szczególności rozważane są ciągi pojedynczych i podwójnych gaussowskich impulsów opisujące zmiany w czasie amplitud tunelowania między oczkami łańcucha. Podwójny gaussowski impuls w pewnej chwili prowadzi niemal do zaniku tunelowania między sąsiednimi oczkami, co de facto oznacza chwilowe rozerwanie łańcucha i może skutkować uformowaniem stanów brzegowych. Moim zdaniem stany brzegowe mogą się uformować zarówno w fazie SSH1 jak i SSH0. Jeżeli rozważymy łańcuch SSH z periodycznymi warunkami brzegowymi, to oba przypadki tunelowań $v < w$ i $v > w$ są fizycznie identyczne. Różnice zobaczymy, jeśli rozerwiemy zamknięty łańcuch. Jeśli rozerwiemy łańcuch usuwając jedno połączenie typu w (tzn. jedno $w=0$), wówczas na końcach łańcucha powstaną stany brzegowe, jeśli $v < w$. Jeżeli usuniemy jedno połączenie typu v (tzn. $v=0$), wtedy stany brzegowe powstaną, ale jeśli $v > w$. Sądzę zatem, że w przypadku podwójnych gaussowskich impulsów, kiedy następuje chwilowe rozerwanie łańcuchów, stany brzegowe (z energiami w przerwie energetycznej) mogą tworzyć się zarówno w fazie SSH1 jak i SSH0. Chciałbym podkreślić, że przedstawiony obraz jest prawdopodobnie zbyt uproszczeniem, niemniej ciekawi mnie opinia Doktoranta na ten temat.

Szósty artykuł [Materials **14**, 3289 (2021)] poświęcony jest analizie topologicznych łańcuchów umieszczonych na podłożach dwuwymiarowych, scharakteryzowanych różnymi gęstościami stanów. Analiza jest szeroka, a spośród prezentowanych wyników najbardziej zaintrygował mnie przypadek, kiedy energie stanów topologicznych łańcucha znajdują się w pobliżu brzegu pasma energetycznego podłoża. Wówczas gęstość stanów na końcach łańcucha ma jednocześnie charakter dyspersyjny wynikający ze sprzężenia z podłożem oraz ujawnia wąskie maksimum typowe dla odizolowanych

łańcuchów. Ciekawe są również wyniki dotyczące łańcuchów, których atomy (bądź pary atomów) na przemian sprzężone są z różnymi elektrodami. W takich konfiguracjach można zaobserwować asymetrię przestrzenną lokalnych gęstości stanów łańcucha oraz rozszczepienie energii stanów topologicznych.

Podsumowując, zakres prezentowanych w rozprawie wyników jest imponujący. Siedem publikacji w dobrych czasopismach naukowych mógłby stanowić bardzo przyzwoitą rozprawę habilitacyjną. Nie sposób ze szczegółami opisać wszystkich rezultatów. W mojej recenzji starałem się raczej sformułować pytania, które nasunęły mi się w trakcie czytania dysertacji. Chciałbym podkreślić, że Pan Marcin Kurzyna znakomicie radzi sobie z metodami analitycznymi jak i numerycznymi metodami opisu badanych układów. Rozprawa stanowi potężne dzieło dotyczące łańcuchów atomowych przygotowanych na różnych podłożach i poddanych różnym zaburzeniom. Jest nie tylko pracą ważną dla eksperymentatorów, ale również ciekawą dla teoretyków. Autoreferat i artykuły napisane są w sposób ciekawy, a czasami barwny. Rozprawę czytałem z przyjemnością. Nie mam wątpliwości, że rozprawa spełnia wszystkie wymagania stawiane pracom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie Pana Marcina Kurzynę do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Ponadto, jeśli obrona rozprawy doktorskiej przebiegnie pomyślnie, będę wnioskował o jej wyróżnienie.



Prof. Krzysztof Sacha