



INSTYTUT FIZYKI MOLEKULARNEJ

POLSKIEJ AKADEMII NAUK

ul. Mariana Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań

Zakład Teorii Ciała Stałego

dr hab. Grzegorz Michałek

email: grzechal@ifmpan.poznan.pl

Poznań, 12 lipca 2022 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgra inż. Marcina Kurzyny
Właściwości elektryczne normalnych i topologicznych łańcuchów atomowych
na różnych podłożach

Rozprawa doktorska mgra inż. Marcina Kurzyny została napisana w Katedrze Fizyki Powierzchni i Nanostruktur w Instytucie Fizyki, na Wydziale Matematyki Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, pod kierunkiem dr. hab. Tomasza Kwapińskiego, prof. UMCS.

Od kilkunastu lat obserwuje się ogromny wzrost zainteresowania badaniami struktur 1D (nanodrutów, nanorurek, nanowłókien i in.) oraz izolatorów topologicznych. Struktury 1D, jako części składowe nowoczesnych urządzeń, nie mogą być w pełni izolowane od otoczenia ani innych elementów układu, a ich rola nie ogranicza się tylko i wyłącznie do połączeń pozostałych elementów. Wiele ich potencjalnych zastosowań w nanoelektronice, nanofotonice, spintronice, komputerach kwantowych, detekcji chemicznej i biologicznej i in., wymaga dokładnego poznania i wyjaśnienia zjawisk towarzyszących transportowi elektronów. Z kolei o doniosłej roli izolatorów topologicznych świadczy m.in. przyznanie w 2016 r. Nagrody Nobla w dziedzinie fizyki za *teoretyczne odkrycia topologicznych przejść fazowych i topologicznych faz materii*. Rozprawa doktorska mgra inż. Marcina Kurzyny dotyczy **opisu teoretycznego właściwości elektrycznych normalnych i topologicznych łańcuchów atomowych na różnych podłożach** przez co doskonale wpisuje się w aktualne trendy badawcze. Badania łańcuchów atomowych mają ogromne znaczenie dla ich przyszłych zastosowań w układach elektronicznych, w których rolę tranzystorów będą pełniły kropki kwantowe, molekuły, a nawet pojedyncze atomy.

Rozprawa doktorska liczy 164 strony i składa się z 5 rozdziałów, streszczeń w języku polskim i angielskim, obszernego (131 pozycji) spisu literatury oraz kopii 7 artykułów naukowych.

Rozdział 1 wprowadza w problematykę rozprawy. Zostały w nim wyjaśnione podstawowe pojęcia oraz przedstawione metody wytwarzania i podstawowe techniki pomiaru właściwości

nanostruktur wraz z oceną ich przydatności w badaniach łańcuchów atomowych. Rozdział 1 zawiera również motywację Autora i szereg celów szczegółowych.

W rozdziale 2 Doktorant rozpoczyna od omówienia podstaw topologii, a następnie przechodzi do opisu modelu SSH (Su-Schrieffer-Heeger) topologicznego łańcucha atomowego, który charakteryzuje się bazą dwuatomową i został wybrany ze względu na swoją prostotę oraz liczne sposoby realizacji eksperymentalnej. W zależności od stosunku wartości sprzężenia w obrębie komórki v do wartości sprzężenia między sąsiednimi komórkami w łańcuch może być w stanie normalnym (tzw. łańcuch normalny) gdy $v = w$ lub w jednej z dwóch faz topologicznych: w fazie trywialnej (tzw. łańcuch trywialny) gdy $v > w$ oraz w fazie nietrywialnej (tzw. łańcuch nietrywialny) gdy $w > v$. Fazę nietrywialną charakteryzuje obecność stanów topologicznych na końcach łańcucha oraz przerwa energetyczna na atomach (węzłach) wewnętrznych. W rozdziale 2 Autor omówił również techniki obliczeniowe użyte podczas badań: metodę równań ruchu w formalizmie funkcji Greena, która w publikacjach [1], [2] i [6] posłużyła do wyznaczenia lokalnej gęstości stanów, obsadzenia węzłów i przewodności w stanie stacjonarnym oraz metodę operatora ewolucji, która w publikacjach [3]-[5] posłużyła do wyznaczenia zależności czasowych lokalnej gęstości stanów, obsadzenia węzłów i prądów płynących przez łańcuch. Zastosowanie obu metod obliczeniowych zademonstrowano dla prostych układów atomowych na powierzchni, dla których w przybliżeniu nieskończenie szerokiego pasma możliwe jest znalezienie rozwiązań analitycznych. W szczególności Doktorant przedstawił schemat wyprowadzenia wyrażenia na zależne od czasu elementy operatora ewolucji (2.67).

Rozdziały 3, 4 i 5 oraz cykl 7 artykułów naukowych zawierają oryginalne wyniki Autora.

Rozdział 3 rozprawy jest w całości poświęcony programowi **Nano Modeller** autorstwa mgr inż. Marcina Kurzyny. Program składa się z warstwy obliczeniowej oraz interfejsu użytkownika. Graficzny interfejs programu, odpowiedzialny za interakcję użytkownika z warstwą obliczeniową, podzielony został na 7 segmentów i jest bardzo funkcjonalny. W rozdziale 3 oraz w krótkim filmie instruktażowym (dołączonym na płycie CD) Twórca szczegółowo objaśnia wszystkie elementy graficznego interfejsu użytkownika a następnie w przystępny sposób demonstrowuje działanie programu: tworzenie nowych modeli, zmianę ich parametrów, wykonywanie obliczeń w stanie stacjonarnym i dynamicznych (zależnych od czasu). Rezultaty obliczeń można prześledzić na wykresach, których tworzenie w programie **Nano Modeller** przebiega w sposób szybki i intuicyjny. Należy podkreślić, że w programie **Nano Modeller** dostępny jest również zupełnie nowy typ wykresu (współautorstwa mgr inż. Marcina Kurzyny), nazwany **wykresem warkoczowym** (ang. *braid plot*) i opisany w publikacji [7].

W rozdziale 4 każdą publikację omówiono według podobnego schematu: na początku Autor przedstawia szczegółowe cele i formułuje hipotezy badawcze, a następnie przedstawia najważniejsze wyniki. W rozdziale 4 możemy się również zapoznać z pozostałymi osiągnięciami Doktoranta. Warto podkreślić, że mgr inż. Marcin Kurzyna jest współautorem artykułu naukowego z inżynierii oprogramowania, a do publikacji przygotowywana jest praca przeglądowa: M. Dachniewicz, M. Kurzyna, T. Kwapiński, M. Jałochowski, *Dark states in atomic chains*, w której obliczenia teoretyczne znalazły odzwierciedlenie w badaniach eksperymentalnych. Autor brał również czynny udział w 6 konferencjach krajowych i zagranicznych, podczas których wygłosił 5 referatów oraz przedstawił 4 plakaty (1 wyróżniono), a obecnie jest wykonawcą w granicie NCN.

W rozdziale 5 Autor zawarł podsumowanie najważniejszych rezultatów badawczych a także przedstawił swoje ambitne plany na przyszłość.

Podstawę rozprawy doktorskiej mgr inż. Marcina Kurzyny stanowi 7 publikacji, w tym: 2 w **Physical Review B** ([3], [4]), 2 w **Journal of Applied Physics** ([1] – wyróżnienie Redaktora, [2]), 1 w **Applied Sciences-Basel** ([5]), 1 w **Materials** ([6]) i 1 w **IEEE Computer**

Graphics and Applications [7]. Z załączonego oświadczenia wynika, że mgr inż. Marcin Kurzyna odgrywał istotną rolę w przygotowaniu (udział 50%) każdej z publikacji, począwszy od pomysłu na przeprowadzenie badań, poprzez stawianie hipotez badawczych, wykonywanie obliczeń analitycznych i numerycznych, analizę wyników i wizualizację danych, a na przygotowaniu manuskryptów do publikacji skończywszy. Wszystkie prace ukazały się w bardzo dobrych, specjalistycznych czasopismach naukowych z listy *Journal Citation Reports* (JCR), a więc zostały poddane skrupulatnej analizie i ocenie w procesie recenzji, dlatego omówię je skrótowo, skupiając się na najważniejszych wynikach.

W publikacjach [1] i [6] Doktorant analizował właściwości elektryczne układów niemagnetycznych, a w publikacji [2] uwzględnił sprzężenie spin-orbita typu Rashby i procesy odwrócenia spinu (tzw. spin-flip). Wszystkie obliczenia wykonano dla układów w stanie stacjonarnym, w temperaturze $T = 0$ i przy założeniu, że oddziaływania kulombowskie nie są istotne.

W publikacji [1], *Non-local electron transport through normal and topological ladder-like atomic systems*, rozważano kwazi-1D łańcuchy atomowe zbudowane z łańcucha głównego i sprzężonego z nim, krótszego łańcucha dodatkowego. Przewodność wzdłuż łańcucha głównego w fazie normalnej oscyluje w funkcji długości łańcucha dodatkowego z okresem wynoszącym dziesiątki atomów. Ten nowy rezultat oznacza, że rozpatrywane układy są prawie niewrażliwe na przypadkowe zakłócenia takie jak pojedyncze atomy lub małe zmiany długości łańcucha dodatkowego. Umożliwia to precyzyjną kontrolę przewodności łańcucha głównego poprzez zmianę ilości atomów w łańcuchu dodatkowym (np. metodami epitaksji z wiązki molekularnej), co jest niezwykle istotne z punktu widzenia potencjalnych zastosowań. Sprzężenie z powierzchnią nie zmienia okresu oscylacji przewodności natomiast ich amplituda maleje wraz ze wzrostem sprzężenia z podłożem, szczególnie dla podłoży, w których elektrony są dobrze zlokalizowane (tj. gdy podłożem jest izolator). W przypadku łańcuchów nietrywialnych przewodność, lokalna gęstość stanów i kształt stanów topologicznych również są niewrażliwe na zakłócenia zewnętrzne. Autor przypuszcza, że takie zachowanie można wykorzystać do rozróżnienia w eksperymencie stanów topologicznych od stanów normalnych: te pierwsze są niewrażliwe na zakłócenia zewnętrzne, a te drugie zmieniają swoje położenie w obecności atomów adsorbowanych na powierzchni i sprzężonych z łańcuchem. Wykazano, że stany chronione topologicznie nie są niszczone przez sprzężenie z podłożem. Oznacza to, że stany topologiczne można zaobserwować doświadczalnie nawet w przypadku atomów adsorbowanych na powierzchni i dołączonych do prawie każdego węzła łańcucha. Brak oscylacji Friedel'a w topologicznych łańcuchach topologicznych pozwala na eksperymentalne rozróżnienie między układami normalnymi, a topologicznymi.

W publikacji [6], *Topological atomic chains on 2D hybrid structure*, analizowano wpływ geometrii łańcuchów atomowych oraz wpływ geometrii podłoża (elektrod 2D) na lokalną gęstość stanów. Rozpatrywano łańcuchy topologiczne w kształcie odcinków, których każdy atom sprzężony jest z tą samą elektrodą 2D oraz łańcuchy o kształcie łamanych: w geometrii krzesła (ang. *armchair*) lub zygzaka (ang. *zig-zag*) umieszczonych pomiędzy dwiema różnymi elektrodami 2D. Rozpatrywano elektrody 2D z osobliwościami typu van Hove'a, często spotykanymi w rzeczywistych strukturach, np. w grafenie, silicenie czy antymonienie. W przypadku prostych łańcuchów nietrywialnych elektrody 2D z osobliwościami typu van Hove'a znacznie modyfikują lokalną gęstość stanów wzdłuż łańcucha, która może stać się asymetryczna względem poziomu Fermiego, co świadczy o złamaniu symetrii elektron-dziura i nie było wcześniej obserwowane. Ponadto podłoża 2D w istotny sposób wpływają na stany topologiczne: wywołują silną asymetrię w ich strukturach energetycznych, powodują ich rozszczepienie lub silną lokalizację. Jeżeli energia poziomów atomowych zbliża się do krawędzi pasma w elektrodzie, to pojawia się asymetryczny stan topologiczny, który składa się z szerokiego pasma w kształcie krzywej Lorentza

oraz wąskiego, wysokiego pik. Taki kształt stanu topologicznego również nie był wcześniej obserwowany. Ponadto, dla większych energii, znaleziono stany topologiczne, które leżą poza krawędzią pasma w elektrodzie 2D. W przypadku łańcuchów łamanych, połączonych z elektrodami 2D o różnych gęstościach stanów, znaleziono, że maksima stanów topologicznych mogą pojawiać się na obu krawędziach dla różnych energii, co jest nową cechą stanów topologicznych.

W publikacji [2], *Electronic properties of atomic ribbons with spin-orbit couplings on different substrates*, po raz pierwszy zbadano wpływ sprzężenia spin-orbita typu Rashby oraz procesów odwrócenia spinu na właściwości elektryczne łańcuchów i wstęg atomowych na różnych podłożach. Dla krótkich łańcuchów atomowych (2 węzły) na podłożu, lokalna gęstość stanów (względem poziomu Fermiego) nie jest funkcją symetryczną. Źródłem asymetrii mogą być elektrony przewodnictwa w podłożach metalicznych oraz sprzężenie spin-orbita i procesy spin-flip. Na końcach długich łańcuchów normalnych, sprzężonych z podłożem, sprzężenie spin-orbita i procesy spin-flip wywołują spinowo-zależne oscylacje Friedel'a, które znikają we wnętrzu łańcucha. Amplituda tych oscylacji zmniejsza się wraz ze wzrostem lokalizacji elektronów w podłożu. Z kolei w szerokich wstęgach atomowych (3 łańcuchy normalne) sprzężenie spin-orbita i procesy spin-flip wywołują wzdłuż całego łańcucha oscylacje lokalnej gęstości stanów, które w łańcuchach sąsiednich mają zgodne lub przeciwne fazy odpowiednio dla małych i dużych sprzężeń. Jednak i w tym przypadku jedynie końce łańcuchów są spolaryzowane spinowo. W łańcuchach nietrywialnych sprzężenie spin-orbita i procesy spin-flip są źródłem spinowo-zależnych oscylacji Friedel'a, widocznych w całym łańcuchu oraz rozszczepiają stany topologiczne. W tym wypadku każdy węzeł łańcucha jest spinowo spolaryzowany. W rezultacie badań Autor proponuje wykorzystanie długich łańcuchów atomowych na powierzchni jako nośnika pamięci magnetycznej, który można kontrolować zmieniając parametry powierzchni i siłę sprzężenia spin-orbita.

W publikacji [7], *Braid plot – a mixed palette plotting method as an extension of contour plot*, przedstawiony jest nowy, oryginalny sposób prezentacji danych na wykresach trójwymiarowych, który jest alternatywą dla tradycyjnych wykresów konturowych lub powierzchniowych z jedną paletą barw. Istotą metody, współautorstwa Doktoranta, jest wybór dwóch lub więcej palet kolorów, które są łatwo rozróżnialne dla ludzkiego oka i które przeplata się ze sobą naprzemiennie z dużą częstotliwością. Nowa technika, nazwana **wykresem warkoczowym**, umożliwia tworzenie rysunków wysokiej rozdzielczości co pozwala dokładniej określić obszary o prawie równych wartościach badanej wielkości i dostrzec szczegóły, których brakuje na tradycyjnych wykresach. Omawiana technika była kluczowa dla odkrycia struktur **kryształów przejściowych** (ang. *transient crystals*) analizowanych szczegółowo w publikacji [4]. Publikacja [7] zawiera przykładowe rysunki tych struktur. Ze względu na swoje zalety, **wykresy warkoczowe** mogą znaleźć szerokie zastosowanie w różnych dziedzinach nauki i techniki.

W publikacjach [3]-[5] Doktorant analizował wpływ zaburzeń zależnych od czasu w układach niemagnetycznych. Wszystkie obliczenia wykonano w temperaturze $T = 0$. W publikacjach [3] i [4] uwzględniono oddziaływania kulombowskie między elektronami z najbliższych węzłów.

W publikacji [3], *Edge-state dynamics in coupled topological chains*, Autor zbadał przejście fazowe, od łańcucha normalnego do łańcucha nietrywialnego, wywołane nagłą zmianą sprzężenia między węzłami. Stan topologiczny w lokalnej gęstości stanów nie pojawia się natychmiast po zaburzeniu, a czas jego tworzenia zależy od rodzaju podłoża sprzężonego z łańcuchem. Dla łańcucha na powierzchni metalu stan topologiczny w lokalnej gęstości stanów szybko i płynnie wzrasta wraz z upływem czasu. Na podłożu z izolatora, lokalna gęstość stanów oscyluje w czasie a czas tworzenia stanu topologicznego jest kilkadziesiąt razy dłuższy. W przypadku rozerwania łańcucha nietrywialnego, stany topologiczne nie zmieniają się (są chronione topologicznie). Stany wewnątrz łańcucha również nie ulegają zmianom. Natomiast

na końcach, w miejscu przełamania, z pasm bocznych łańcucha nietrywialnego, powstają nowe stany topologiczne. Zbadano również jak lokalna gęstość stanów ewoluuje podczas łączenia takich samych lub różnych łańcuchów topologicznych otrzymując szereg nowatorskich wniosków, które są wymienione w podsumowaniu publikacji [3]. Najciekawsze rezultaty otrzymano w przypadku gwałtownego łączenia łańcucha nietrywialnego z łańcuchem trywialnym. Stan topologiczny z łańcucha nietrywialnego może częściowo przepływać wewnątrz układu, a więc jednocześnie istnieć na sąsiednim stanie tego samego łańcucha oraz sprzężonych stanach łańcucha trywialnego. Po gwałtownym włączeniu oddziaływań kulombowskich między łańcuchem normalnym i łańcuchem nietrywialnym znaleziono, że: oscylacje Friedel'a z łańcucha normalnego indukują w łańcuchu nietrywialnym oscylacje ładunku o fazie przeciwnej. To rezultat zaskakujący ponieważ z powodu przerwy energetycznej w lokalnej gęstości stanów, na węzłach wewnętrznych łańcucha nietrywialnego, fale gęstości ładunku powinny być w nim silnie stłumione.

W publikacji [4], *Nontrivial dynamics of a two-site system: transient crystals*, Doktorant analizuje czasowo-przestrzenne zależności lokalnej gęstości stanów w krótkim łańcuchu atomowym (2 węzły) wywołane nagłym dołączeniem elektrod zewnętrznych i włączeniem sprzężenia między węzłami. W przybliżeniu szerokiego pasma znaleziono wyrażenia analityczne dla operatora ewolucji, które pozwoliły na analizę dynamiki lokalnej gęstości stanów na obu węzłach. Odkryto, że w zależnościach czasowych lokalnej gęstości stanów pojawia się regularna struktura pików, której wzór (wraz z upływem czasu) odpowiada strukturze gęstości stanów łańcucha atomowego (o coraz większej długości) w stanie stacjonarnym. Ten nowy układ 1D, nazwany **kryształem przejściowym**, jest krótkotrwały, nie znika w obecności oddziaływań kulombowskich między stanami i może zostać wykryty w pomiarach przewodności. Okazało się również, że rodzaj powierzchni połączonej z łańcuchem atomowym nie wpływa na wzór **kryształu przejściowego** a jedynie na amplitudę pików lokalnej gęstości stanów. Autor zaproponował wykorzystanie badanego układu jako wydajnej pompy elektronowej sterowanej tylko jednym parametrem: napięciem bramki. Należy podkreślić, że odkrycie **kryształów przejściowych** było możliwe dzięki nowatorskiej technice **wykresów warkoczowych**, współautorstwa Doktoranta, opisaną w publikacji [7].

W publikacji [5], *Electron Pumping and Spectral Density Dynamics in Energy-Gapped Topological Chains*, Autor jako pierwszy zbadł procesy pompowania elektronów w łańcuchach topologicznych zaburzanych przez 1 impuls gaussowski lub serię 2 impulsów gaussowskich (ang. *train impulse*). Okazało się, że łańcuchy trywialne są wydajniejszymi pompami elektronów niż łańcuchy nietrywialne. Znaleziono, że transport elektronów przez łańcuch trywialny odbywa się głównie przez pasma boczne, indukowane w lokalnej gęstości stanów, poza obszarem przerwy energetycznej. Natomiast w łańcuchach nietrywialnych elektrony przenoszone są przez pasma tymczasowe, wewnątrz przerwy, które są utworzone ze stanów topologicznych. Odkryto, że w łańcuchach topologicznych można kontrolować kierunek pompowania elektronów nieznacznie zmieniając napięcie bramki. Ponadto znaleziono, że w wyniku gwałtownej zmiany sprzężeń między atomami, które przekształca łańcuch nietrywialny w łańcuch trywialny lub w łańcuch normalny, stany topologiczne nie znikają od razu lecz balansują pomiędzy końcami łańcucha z zanikającymi intensywnościami. Co więcej, prędkość rozchodzenia się stanów topologicznych w łańcuchu normalnym jest znacznie większa niż w łańcuchach trywialnych.

Rezultaty badań, przedstawione w pracach [3], [4] i [5] są bardzo ważne z punktu widzenia potencjalnych zastosowań łańcuchów topologicznych w nanoelektronice.

Podczas redakcji rozprawy Autorowi nie udało się uniknąć drobnych usterek i nieścisłości, które wymieniam z recenzenckiego obowiązku. W kilku miejscach rozprawy (streszczenie, str.: 13, 14, 16, 19, 53, 63) Doktorant używa terminu *przewodnictwo* choć lepiej pasuje *przewod-*

ność lub konduktancja. Warto zastąpić na powierzchniach izolatorowych, podłożom izolatorowym, podłoża izolatorowego, podłożach izolatorowych przez np. na powierzchni izolatora, podłożu z izolatora, itd. *Winding number* to indeks krzywej względem punktu. W (2.4) i (2.5) brak (). W (2.6) i (2.7) brak $\sum_{\vec{k}}$. Str. 25, powinno być: $R_y(k) = -w \sin k$ oraz na ilustracji prawej, gdzie $v < w$. Str. 26: w definicji $\theta(t - t')$ brak $\lim_{\eta \rightarrow 0+}$. W (2.11)–(2.13) brak $\hbar$. Str. 27: brak definicji *przewodności*. Str. 28: powinno być: $\hat{a}_i^\dagger$ oraz $\hat{a}_i$. W (2.40) powinno być: $\prod_{m=1}^{N-i}$. W (2.49) źle wstawiony (. W (2.61) i (2.62) powinno być $e^{-i(\epsilon_{m'} - \epsilon_{k\alpha})}$. W (2.63) jest: $e^{i\epsilon_i(t'-t)}$ a w Eq. (5) z publikacji [3]: $e^{i\epsilon_i(t-t')}$. Na str. 2 publikacji [3]: "For intracell couplings greater than intercell couplings we get a topological chain in the nontrivial phase, ...", podobnie jest na str. 3 publikacji [5]. Powinno być odwrotnie: *intercell coupling greater than intracell coupling*. Błędnie zdefiniowano impulsy gaussowskie na str. 4 publikacji [5].

Te drobne niedociągnięcia nie wpływają istotnie na moją ocenę rozprawy doktorskiej, która prezentuje wysoki poziom merytoryczny.

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska została napisana poprawną polszczyzną, jest logicznie skomponowana i przejrzysta zredagowana. Zawiera szereg oryginalnych i wartościowych wyników opublikowanych w bardzo dobrych, recenzowanych czasopismach naukowych. W swoich badaniach Doktorant stosował zaawansowane metody teoretyczne, wykonał wiele żmudnych obliczeń analitycznych, a także czasochłonnych obliczeń numerycznych. Autor bardzo dobrze orientuje się w zagadnieniach związanych z tematyką rozprawy: obficie cytuje najnowsze pozycje i trafnie dobiera je do omawianych zagadnień, co świadczy o tym, że na bieżąco śledzi literaturę. **Podsumowując stwierdzam, że rozprawa doktorska spełnia wszystkie warunki określone w art. 13 ust. 1 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. 2003 nr 65 poz. 595, z późn. zm.) i wnoszę o dopuszczenie mgr inż. Marcina Kurzyny do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

Biorąc pod uwagę rangę wyników i rangę czasopism w jakich zostały opublikowane jak również samodzielność (autorski program **Nano Modeller**) i kreatywność (opracowanie techniki **wykresów warkoczowych**) Doktoranta w rozwiązywaniu skomplikowanych zagadnień, **uważam, że rozprawa doktorska zasługuje na wyróżnienie.**

Grzegorz Michalek