

Kraków, 18 listopada 2024



INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ

im. Henryka
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

**Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr inż. Piotra Ruszała
pt.: „Badanie struktury elektronowej związków międzymetalicznych
o liniowej dyspersji pasm typu Diraca/Weyla”**

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska pan mgr inż. Piotra Ruszała, pt. „Badanie struktury elektronowej związków międzymetalicznych o liniowej dyspersji pasm typu Diraca/Weyla”, została przygotowana w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu. Doktorantka wykonała ją pod kierunkiem promotora dr hab. Małgorzaty Samsel-Czeakały, prof. INTiBS, oraz promotora pomocniczego dra hab. inż. Macieja J. Winiarskiego.

Dysertacja, opracowana w języku polskim, ma charakter teoretyczny i stanowi zbiór sześciu prac dotyczących wybranych układów, zawierających liniowe pasma. Praca liczy łącznie 147 stron, podzielona jest na 4 rozdziały, poprzedzonych (nienumerowanymi): *Streszczeniem* (w języku angielskim oraz polskim), *Spisem akronimów*, *Spisem stosowanych oznaczeń*, oraz omówieniem *Dorobku naukowego autora*. Całość zwieńczona jest *Podsumowaniem* oraz *Bibliografią* (zawierającą 273 pozycji).

Rozdział pierwszy: wstęp stanowi wprowadzenie ogólne do zagadnienie topologii w obecnych badaniach (Sekcja 1.1) oraz omówienie zagadnień i związków stanowiących główne zainteresowania doktoranta (Sekcja 1.2). Następnie autor omawia cel i zakres pracy (Sekcja 1.3) oraz zastosowane metody (Sekcja 1.4).

Sekcja 1.1 związana jest właściwie z aspektem historycznym – niemniej czuje niedosyt – ta sekcja mogłaby być dłuższa. Brakło wprowadzenia/wyjaśnienia wszystkim „dobrze znanych” pojęć, związanych z własnościami topologicznymi (w kontekście struktury elektronowej). W Sekcji 1.2 w moim odczuciu brakuje ilustracji obrazujących omawiane związki i ich „własności”. Po pierwsze jest to doskonałe miejsce do pokazania struktury krystalicznej omawianych związków – ułatwiłoby to odbiór czytanego tekstu – szczególnie gdy mowa o „sieciach kwadratowych” w komórce (w moim przypadku



INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ

im. Henryka
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

pomocne jedynie było doświadczenie w badaniu związków o symetrii $P4/nmm$). Po drugie mowa np. o silnie liniowych pasm, lub linie węzłowe – ilustracje mogły wzbogacić tekst i ułatwić odbiór. W tej części brakło wyjaśnienia pewnych pojęć – już wspomniane „linie węzłowe” (lub z *ang.* nodalne) – obawiam się, że dla czytelników bez doświadczenia w tym zakresie, obiór mógłby być utrudniony. Miałem odczucie, że kolejne paragrafy czasami są bardzo luźno związane z poprzednimi – zapewne wynikało to z dużej różnorodności omawianych związków. W tym kontekście brakowało np. jakiegoś schematu pokazującego zależności pomiędzy omawianymi strukturami/związkami. Sekcja 1.3 omawia cel pracy oraz strukturę rozprawy. Sekcja 1.4 omawia zastosowaną metodologię (tj. DFT). Wydaje mi się, że ta sekcja jest najbardziej związana z pracą naukową doktoranta i powinna być wyróżniona jako osobny rozdział – w obecnej formie brakuje mi głębszego omówienia zastosowanych metod.

W paru miejscach (np. już w pierwszej sentencji Sec. 1.1) należałoby dodać odnośnik literaturowy (ze względów dydaktycznych dla pozostałych czytelników). Zdarza się parę zdań zawierających zwrot „na podstawie wielu badań”, przy jednoczesnym braku odnośników literaturowych. Pojawia się parę ogólnych zgań, np. str. 14: „Uporządkowanie magnetyczne w tych układach może powodować powstawanie nowych, egzotycznych stanów topologicznych.” – pojawia się pytanie jakich stanów?. A względem poprzedniej uwagi: gdzie je opisano? Co ciekawe, w paru miejscach pojawiają się zwroty dosyć egzotyczne na pierwszy rzut oka – tu pragnę wspomnieć prawidłowy zwrot ze strony 18 „odwrócona symetria pasm” – egzotyka wynika z „codziennego” używania nazw angielskich, więc bardziej naturalna wydaje się inwersja pasm.

Rozdział drugi: omówienie teoretyczne. Pomimo, że prace wchodzące w cykl stanowiący podstawę rozprawy dotyczą zagadnień obliczeniowych, autor podjął ryzyko omówienia pewnych zagadnień w sposób czysto teoretyczny. Niestety brakuje mi prostego wprowadzenia – co i dlaczego będzie omówione. Standardowo pojawiło się (niestety) wiele nawiązań do fizyki wysokich energii (np. równanie Diraca, równanie Weyla), ale zabrakło prostego wyjaśnienia bezpośredniego związku z fizyką ciała stałego. Częściowo jest to omówione w Sekcji 2.7 (Właściwości semimetali topologicznych).

Najważniejszym moim zastrzeżeniem do tego rozdziału jest jawny brak wyjaśnienia dlaczego struktury zawierające „obróconą” sieć kwadratową (z *ang.* *square net*) są interesujące pod względem topologicznym. Wydaje mi się, że to zagadnienie jest najbardziej kluczowe względem prezentowanych prac – liczę, że podczas obrony doktorant przedstawi wyjaśnienie i omówienie bazujące na prostej analizie modelu ciasnego wiązania takiej sieci.



INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ

im. Henryka
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

Rozdział trzeci: cykl publikacji wchodzących w skład rozprawy. Rozdział ten zawiera zbiór sześciu prac tworzących cykl. Podzielony jest na trzy części: układy 112 (4 publikacje), układ 122 (1 publikacja), układ 11 (1 publikacja). W moim odczuciu podział ten jest zbędny. Cztery prace w pierwszej grupie numerowane są jako D1-D3 i D6 (następna jest praca D4 i D5) – być może stała za tym głębsza idea, ale przy pierwszym czytaniu wzbudza to raczej zdziwienie. Każda publikacja poprzedzona jest opisem merytorycznym – brakuje mi tu dokładnego opisu indywidualnego wkładu autora. Opis taki byłby oczekiwany w przypadku cyklu prac, w których zwyczajowo występuje paru autorów. Sytuację ratuje fakt, że doktorant był pierwszym autorem (prace D1, D3, D6, D4, i D5) przy jedynie współudziale promotora i promotora pomocniczego (prace D1, D3, D6, i D5). Oznacza to, że jako doktorant najpewniej wykonał większą część pracy. Prace D2 i D4 wykonane są przy współudziale grupy eksperymentalnej. Praca D2, D6, D4, i D5 zawiera opis wkładu autorów – typowo jednak są to dość enigmatyczne opisy. W pracy D4 zaskakuje stwierdzenie, że doktorant z promotorami opisali wyniki, a współautorzy odpowiedzialni za część eksperymentalną jedynie „krytycznie” go przeczytali.

Prace wchodzące w skład cyklu zostały już opublikowane w znamienitych czasopismach, nie będę zatem recenzował ich drugi raz. Pozwolę sobie na ich krótkie omówienie (wraz z uwagami/sugestiami/spostrzeżeniami) oraz zadanie paru pytań.

Praca D1: w pracy badane są trzy nadprzewodniki LaTSb_2 , ($T=\text{Ni, Cu, Pd}$). Typowo porównuje się związki z „identyczną” konfiguracją elektronową. W tym przypadku ciężko mówić o podobieństwach gęstości stanów lub struktury elektronowej – jakie jest uzasadnienie dla porównania tych trzech związków? W pracy pokazano sprzężenie elektron-fonon (Tabela 2) – jako zostało znalezione? Powierzchnia Fermiego pomimo symetrii $P4/nmm$ tylko w przypadku LaCuSb_2 posiada charakterystyczny płat w kształcie rombu (płat II na Fig. 4(b)) – jakie jest proste wyjaśnienie jego braku w innych układach?

Praca D2: praca dotyczy związku CeAgAs_2 . W przypadku tym, przy braku symetrii $P4/nmm$, układ zawiera nie-idealną sieć kwadratową atomów As. Z Rys. 15 wynika *folding* pasm w kierunku Y – co przejawia się również w powierzchni Fermiego (Fig. 16(a)). Czy w obliczeniach brano eksperymentalnie znaną strukturę, czy zoptymalizowaną numerycznie? Jak wartość parametru U wpływa na wyniki?

Praca D3: praca dotyczy związków LaSb_2 z symetrią $Cmca$ i LaAgSb_2 z symetrią $P4/nmm$. Pomimo różnych symetrii, pewnie związki między oboma układami zostały pokazane.

Praca D6: związek $\text{LaZn}_{1-x}\text{Bi}_2$ jako kandydat na związek zawierający linie nodalne Diraca. Rys. 1 w tej pracy mógłby być większy – posiada wiele szczegółów, które przy obecnym rozmiarze są ciężkie do odczytania. Fig. 2(b) prezentuje linie nodalne – zielone i niebieskie wynikają wprost z symetrii $P4/nmm$; jak zostały znalezione linie czerwone? Na Fig. 2(c)

i 2(d) pokazano struktury pasmowe dla $\text{LaZn}_{0.5}\text{Bi}_2$ i LaZnBi_2 – co z innymi przypadkami? Jak zmienia się symetria układu z x ?

Praca D4: związek CaIr_2Ge_2 jako układ zawierający pochylone stożki Diraca. Związek realizuje symetrię $I4/mmm$, co oznacza że posiada strukturę centrosymetryczną – ciężko mówić o „silnych” przesłankach dot. własności topologicznych. W tym przypadku mam wątpliwości czy można mówić tu o stożkach Diraca – omówione stożki są realizowane przy braku sprzężenia spin-orbita. Fig. 8 jasno pokazuje wprost brak przecinania się pasm w obecności sprzężenia spin-orbita. W tym przypadku należy pamiętać, że to właśnie sprzężenie spin-orbita jest podstawowym źródłem własności topologicznych. Pytanie czy symetria $I4/mmm$ (ze względu na analizę symetrii grup) pozwala na realizację stożków Diraca pozostaje otwarte.

Praca D5: Układ $\text{La}_{1-x}\text{Tl}_x\text{N}$ o strukturze soli kuchennej. Dla $x=0.5$ i 0.25 w obliczeniach zastosowano odpowiednio dobrane superkomórki. Najciekawszy wynik pokazano w Tabeli 2: TlN oraz $\text{La}_{0.75}\text{Tl}_{0.25}\text{N}$ posiadają własności topologiczne ze względu na obliczony indeks topologiczny $Z_2=(1,000)$.

Ostatecznie **Rozdział czwarty: podsumowanie.** Rozdział zawiera krótkie omówienie prac wchodzących w cykl oraz głównych uzyskanych tam wyników.

Komentarze dot. pozostałych fragmentów rozprawy:

- w spisie akronimów pojawia się ASOC – w kontekście niecentrosymetrycznych związków oznacza to Antysymmetric Spin-Orbit Coupling (np. Rep. Prog. Phys. 80, 036501 (2017)), nie jak podaje zaś autor Asymmetric Spin-Orbit Coupling.
- w spisie akronimów pojawia się TRIM – w tym przypadku (zwyczajowo) chodzi chyba o odwrócenie w czasie, a nie odbicie.
- w paru miejscach źle został zastosowany prowadzony akronim, np. str. 13 „... oraz ciasnego wiązanie (TBM)” przy czym TBM wcześniej wprowadzono jako Tight Binding Method.
- w paru miejscach zdążają się błędy edycyjne (np. str. 11 „3d” może oznaczać orbital, wymiary zazwyczaj oznacza się dużą literą D; podobnie str. 13 quasi-2d, powinno być raczej quasi-2D), nie wpływają jednak na odbiór pracy.

W przedstawionej rozprawie p. mgr inż. Piotr Ruszała przedstawił cykl sześciu prac dotyczących różnego rodzaju związków. Zbiór prac poprzedzony jest dwoma rozdziałami dotyczącymi głównie własności topologicznych. Wydaje mi się, że prace D4 i D5 wykraczają po za tą tematykę. Nie zmienia to jednak faktu, że prace prezentują autorskie i oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. Początkowe rozdziały mogły



INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ

im. Henryka
Niewodniczańskiego

POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptok,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów

mieć inną formę – ale stwierdzenie to zawsze jest prawdziwe i wynika z indywidualnych cech/umiejętności autora i jego przemyśleń nt. omawianego zagadnienia.

Podsumowując, w recenzowanej rozprawie p. mgr inż. Piotrowi Ruszała przedstawił oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, udokumentowane artykułami naukowymi. Rozprawa spełnia zatem ustawowe kryteria stawiane rozprawom doktorskim, w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk fizycznych. W związku z powyższych wnoszę o dopuszczenie pana mgr. inż. Piotra Ruszały do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



**INSTYTUT
FIZYKI
JĄDROWEJ**

im. Henryka
Niewodniczańskiego

**POLSKIEJ
AKADEMII
NAUK**

w Krakowie

dr hab. Andrzej Ptak,
prof. IFJ PAN
Zakład Komputerowych
Badań Materiałów