



Recenzja rozprawy doktorskiej pana **mgr. Rajibula Islama** pod tytułem
Topological phases of 3D superlattices and 2D materials: theoretical modeling

Rozprawę doktorską pana mgr. Rajibula Islama stanowią trzy wieloautorskie artykuły opublikowane w recenzowanych czasopismach naukowych. We wszystkich tych publikacjach doktorant jest pierwszym autorem. Wszystkie prace mają charakter obliczeniowy i poświęcone są badaniu metodami „z zasad pierwszych” różnych materiałów 2- i 3-wymiarowych z punktu widzenia występujących w nich faz topologicznych.

Oświadczenie o wkładzie własnym, przedstawione przez p. Islama, wraz ze spójnymi z nim oświadczeniami współautorów, pozwalają jednoznacznie wydzielić indywidualny wkład doktoranta w opublikowane prace, a nawet wskazują na jego wyłączny wkład w realizację zadań badawczych oraz znaczący udział w formułowaniu celów badawczych, interpretacji wyników i redagowaniu tekstów. Stwierdzam jednakże, że przedstawione oświadczenia doktoranta i współautorów o niemal wyłącznym wkładzie p. R. Islama w powstanie publikacji stoją w sprzeczności do jawnie podanego w drugiej z przedstawionych publikacji równego wkładu dwóch pierwszych autorów. Dowodzi to popełnienia przez doktoranta co najmniej nieuczciwości naukowej w jednej z tych deklaracji wkładu. Wobec tej poważnej wątpliwości uważam, że publikacja w Phys. Rev. B **104**, L201112 (2021) nie powinna zostać uwzględniona jako podstawa do nadania stopnia naukowego (mimo to omawiam ją poniżej tak jak i pozostałe dwie). Niemniej, rozprawa ograniczona do dwóch pozostałych publikacji nadal spełnia formalne wymogi art. 187 ust. 3 ustawy *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce*, jeśli rozumieć ją jako wyodrębnioną część pracy zbiorowej, którą stanowią te dwa pozostałe opublikowane artykuły, w przypadku których nie ma formalnych podstaw do zakwestionowania wkładu doktoranta.

Przedstawione jako podstawa do nadania stopnia artykuły zostały – zgodnie z godnym pochwały zwyczajem – poprzedzone ogólnym wstępem, w którym doktorant najpierw wprowadza w temat topologicznych faz materii (rozdział 1), a następnie przedstawia w zarysie podstawy i metodologię stosowanych w jego pracy naukowej obliczeń DFT (rozdział 2). Wstęp ten, a zwłaszcza jego pierwsza część, jest słaby, a nawet wręcz niechlujny pod względem językowym, redakcyjnym i merytorycznym. Znaleźć w nim można niezdefiniowane symbole (np. Teta pod wzorem (1.4)), nieprecyzyjne sformułowania (np. *the Hamiltonian can be split into two sub-spaces* albo *mirror operator is invariant on a fixed plane*), błędy w formułach (np. indeks k zamiast R w równaniu (2.30)), a także całkowicie niejasne stwierdzenia, jak np. *The band inversion can be tuned with impurity of strain, it also influences the size of the nodal line which is a interesting platform to study correlated materials and flat band physics*. Nie rozumiem też, jak formalizm oparty na Hamiltonianie z równania (2.33) może być dokładniejszy od (2.32), skoro różnią się one tylko trywialną zmianą bazy.



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wroclawska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wroclaw

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Instytut Fizyki Teoretycznej

Doktorant nie stosuje interpunkcji po wzorach matematycznych, nie kontroluje wcięć tekstu po wzorach, nie dba o odstępy pomiędzy odnośnikiem literaturowym a poprzedzającym go tekstem. Od strony merytorycznej prezentacja nie tylko nie wnosi nic nowego w stosunku do dostępnych prac przeglądowych, ale nawet w wielu miejscach jest niezrozumiała bez odniesienia się do takich prac. Ta hermetyczność tekstu jest szczególnie dokuczliwa dla kogoś, kto – tak jak ja – dysponuje jedynie ogólną wiedzą w prezentowanym przez doktoranta obszarze badań. Zabrakło mi w szczególności nowszych aspektów aktualnego stanu wiedzy i wyjaśnienia technicznych terminów, zarówno bardzo prostych, jak struktury faz 1H, 1T', jak i bardziej złożonych, np. *3D flat bands*. Z artykułu Lau *et al.*, Phys. Rev. X 11, 031017 (2021) udało mi się z grubsza zrozumieć, w jaki sposób takie pasma pojawiają się w topologicznych półmetalach z liniami węzłowymi (nodal line semimetals) w obecności naprężeń, ale ze wstępu do rozprawy nie da się tej informacji zdobyć, choć zagadnie to jest przedstawiane jako główna motywacja pracy. Wydaje mi się, że wspomniany artykuł jest kluczowy dla zrozumienia celu i sensu dużej części pracy doktoranta i powinien wręcz zostać przez niego zreferowany we wstępnej części rozprawy. Najbardziej zaskakującą niezręcznością redakcyjną jest nagłówek rozdziału 1.2, po którym brak jakiegokolwiek tekstu. A szkoda, bo tu właśnie doktorant mógłby sformułować ogólny cel pracy, syntetycznie przedstawić swoje osiągnięcia i podkreślić spójność tematyczną przedstawionych artykułów (co do której na szczęście w tym przypadku raczej nie ma wątpliwości). Jak się wydaje, wstęp nie stanowi części rozprawy i formalnie zapewne nie podlega ocenie, trudno jednak nie skomentować, że nieumiejętność zredagowania krótkiego tekstu wprowadzającego w tematykę nie najlepiej świadczy o wymaganej ustawowo i oczekiwanej zwyczajowo „umiejętności samodzielnego prowadzenia pracy naukowej” przez doktoranta. Co więcej, oczywiste niespójności we wzorach budzą niepokój co do rozumienia przez niego podstaw formalizmu, a więc „ogólnej wiedzy teoretycznej” (cytaty z ustawy). Dyskusja nad rozprawą przeprowadzona w ramach publicznej obrony powinna rozwiązać te wątpliwości.

Przejdę teraz do omówienia trzech artykułów naukowych stanowiących zasadniczą część rozprawy. Wobec oświadczenia doktoranta i współautorów przyjmuję, że przynajmniej w przypadku pracy pierwszej i trzeciej całość przedstawionych wyników, a także w dominującym stopniu sformułowanie problemu, interpretację wyników i redakcję tekstu, należy przypisać doktorantowi.

W pierwszej spośród tych prac [R. Islam i in., Phys. Rev. Res. 4, 023114 (2022)] autor przeprowadza obliczeniową charakteryzację faz topologicznych w układach supersieci HgTe/CdTe i HgTe/HgSe o krótkim okresie, również w obecności naprężeń (epitaksjalnych i zewnętrznie generowanych). Stosowaną metodą obliczeniową jest DFT (metody oparte na funkcjonale gęstości) oraz wyprowadzone z nich modele ciasnego wiązania – jak rozumiem, te ostatnie stosowane są ze względów praktyczno-obliczeniowych. Jako główna motywacja badań podane jest poszukiwanie topologicznych faz półmetalicznych z liniami węzłowymi



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wroclawska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Politechnika Wroclawska

Instytut Fizyki Teoretycznej

(nodal line semimetals, NLS), w których wystąpić mogą bezdyspersyjne pasma na powierzchni Fermiego, co z kolei otwiera olbrzymią przestrzeń na pojawienie się różnych ciekawych faz w skorelowanych układach wielu cząstek. Prezentowana praca podejmuje ten ciekawy temat, zainicjowany wcześniejszym artykułem [Lau i in., Phys. Rev. X 11, 031017 (2021)] i, choć koncepcyjnie nie wydaje się wносить nic nowego do rozwoju teorii jako takiej, to oferuje bardzo systematyczną i kompletną charakteryzację faz topologicznych w badanych układach. Podstawą tej analizy jest badanie struktury pasmowej, choć zilustrowane są również strumienie Berry'ego, które wykazują strukturę topologiczną. Wśród zidentyfikowanych faz są poszukiwane fazy NLS, ale też – w przypadku HgTe/HgSe, wiele innych znanych faz topologicznych, pomiędzy którymi układ przechodzi pod wpływem odkształceń. Nie umiem ocenić, na ile zakładane odkształcenia (na poziomie 15% zmiany stałej sieci) są realistyczne, ale niezależnie od tego taka materiałowa charakterystyka wydaje mi się ważna i ciekawa. Zakres przedstawionej w tej pracy charakteryzacji obliczeniowej uważam za imponujący. Artykuł zawiera też dobrą kompletną dyskusję omawianych struktur z punktu widzenia ich symetrii, a następnie systematyczną analizę struktur pasmowych i fizyczną dyskusję ich pochodzenia, co wskazuje na dobrą orientację doktoranta w tym obszarze fizyki ciała stałego.

Lektura tego artykułu w świetle zarysu metodologii przedstawionego w rozdz. 2 wstępu do rozprawy rodzi moim zdaniem jedną wątpliwość formalną. Funkcje Psi, słusznie nazwane przez autora orbitalami Kohna-Shama (nad równaniem (2.13)) są w pewnym sensie sztucznym tworem odpowiadającym – w sposób niejednoznaczny – gęstości elektronowej, która jest jedyną wielkością wyznaczaną wprost w obliczeniach DFT. Z niepokojem stwierdziłem, że w dalszym wywodzie (mam tu na myśli rozdział 2 wstępu do rozprawy) funkcje te traktowane są jak prawdziwe funkcje falowe (Blocha), a w końcu nad równaniem (2.24) zostają nazwane *actual wave function* i użyte do charakteryzacji topologicznych cech struktury pasmowej. Nie jestem w najmniejszym stopniu specjalistą w zakresie obliczeń DFT, ale nie wydaje mi się to poprawne, przynajmniej bez dodatkowego uzasadnienia. O ile wiem, istnieją metody odtwarzania faktycznych funkcji Blocha z wyników DFT uzyskanych w ramach metody PAW, ale nie są one trywialne. Natomiast w omawianym artykule pod koniec Rozdziału IV następuje nagły i pozbawiony jakiegokolwiek komentarza metodologicznego przeskok od struktur pasmowych do własności topologicznych funkcji falowych, a metodologia w tym zakresie, podana jednym zdaniem w ostatnim paragrafie Dodatku A, jest określona wyłącznie poprzez odniesienie do funkcjonalności konkretnych pakietów obliczeniowych, co wydaje mi się wręcz naukowo niepoprawne.

W kolejnej pracy [R. Islam i in., Phys. Rev. B 104, L201112 (2021)] doktorant bada metodami obliczeniowymi DFT strukturę elektronową jedno- i kilku-warstwowych materiałów utworzonych ze związków MSi_4Z_4 , gdzie M to molibden lub wolfram, a Z to azot lub arsen. Jest to ciekawa klasa materiałów, również dlatego, że wytwarza się je metodami epi-



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wroclawska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Politechnika Wroclawska

Instytut Fizyki Teoretycznej

taksji, a nie eksfoliacji (nie istnieją objętościowe kryształy macierzyste). W tej pracy doktorant wykazuje również stabilność termodynamiczną takich struktur, jak i odpowiednich materiałów objętościowych. Są to materiały o strukturze heksagonalnej, w których brak jest symetrii inwersyjnej w przypadku jednej warstwy, natomiast symetria taka pojawia się w układzie dwuwarstwowym, a znika ponownie po przyłożeniu pola elektrycznego w osi wzrostu. Wynika stąd dobrze znana z analogicznych układów struktura dolinowo-spinowa, a ponadto w pracy wykazano, że w zależności od składu chemicznego badane struktury jednowarstwowe mogą mieć charakterystykę prosto- lub skośnoprzerwową. Praca wydaje się prezentować raczej rutynowe obliczenia, a jej waga wynika w mojej ocenie głównie z tego, że dotyczy nowego i interesującego materiału. Nasunęły mi się dwie wątpliwości techniczne. Po pierwsze, z podanego przez doktoranta wprowadzenia do publikacji (tym razem bardzo zgrabnego) wynika, że warstwowe materiały tego typu pojawiają się w wyniku pasywacji azotku molibdenu krzemem, a więc zawsze na podłożu MoN. Tymczasem obliczenia zdają się być wykonane na strukturach oderwanych. Czy podłoże nie wpływałoby decydująco na ich własności? Z pewnością obecność podłoża łamie symetrię inwersji. Po drugie, skok do 99,9% wartości niemal dokładnie w punkcie Gamma na rys. 2e jest dziwny. Czy to nie jest numeryczny artefakt?

W ostatniej z zawartych w rozprawie prac [R. Islam i in., Phys. Rev. B **106**, 245149 (2022)] pan Rajibul Islam proponuje i bada (znów metodami DFT) dwuwymiarowy materiał o tej samej stechiometrii co poprzednio, ale o innej strukturze przestrzennej. Dowodzi obliczeniowo jego względnej stabilności, analizując zarówno fononowe zależności dyspersyjne, jak i wyniki dynamiki molekularnej *ab initio*. Wykazuje, że oddziaływania spinowo-orbitalne prowadzą do otwarcia przerwy w punktach przecięcia pasm, prowadząc do struktury kwantowego spinowego izolatora Hallowskiego. Pokazuje ponadto, że w materiale tym następuje zamknięcie przerwy i zachodzi topologiczne przejście fazowe w zależności od zewnętrznego pola elektrycznego. Zaprezentowane tu wyniki są ciekawe i oryginalne. Zaproponowanie nowego materiału na bazie wyników obliczeniowych wydaje mi się istotnym osiągnięciem naukowym. Ciekaw jestem, na ile (statystycznie rzecz biorąc) takie obliczeniowe przewidywania potwierdzają się potem eksperymentalnie. Jeśli chodzi o szczegółowe wyniki, to nie jestem przekonany, na ile badanie stabilności oderwanej warstwy jest miarodajne. Podejrzewam, że w przypadku istnienia dwóch faz o podobnej stabilności o strukturze takiego epitaksjalnie tworzonego materiału decyduje przede wszystkim podłoże, a tego doktorant nie bada, skupiając się – jak zrozumiąłem – na oderwanej warstwie.

Jeżeli za problem naukowy będący przedmiotem rozprawy uznać obliczeniowe zbadanie własności wybranych 2- i 3-wymiarowych materiałów wykazujących fazy topologiczne, to bez wątplenia należy uznać, że problem ten został przez doktoranta rozwiązany w sposób oryginalny w tym sensie, że podane przez niego charakterystyki nie były dotąd znane. Elementem niewątpliwie oryginalnym jest zaproponowanie nowego materiału dwuwymiarowego wykazującego kontrolowane własności topologiczne. Prezentowane analizy



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wroclawska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Politechnika Wroclawska

Instytut Fizyki Teoretycznej

są obszerne, kompletne i dowodzą dobrej znajomości nie tylko rzemiosła obliczeniowego DFT, ale też stosownych obszarów fizyki ciała stałego. Cieniem na prezentowanej rozprawie kładzie się rażąca niespójność w deklarowaniu udziału współautorów, co budzi mój głęboki sprzeciw, jednak nie zamierzam obarczać pełną odpowiedzialnością za ten fakt początkującego naukowca. Nawet bez tego jednego wątpliwego artykułu rozprawa spełniałaby wymogi stawiane pracom doktorskim.

W związku z powyższym, przedstawioną mi do recenzji rozprawę doktorską pana mgr. Rajibula Islama oceniam pozytywnie.

Prof. Paweł Machnikowski



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Politechnika Wroclawska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434