UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

INSTYTUT FIZYKI TEORETYCZNEJ
Zakład Teorii Materii Skondensowanej i Nanofizyki

Prof. dr hab. Adam Rycerz

E-mail: rycerz@th.if.uj.edu.pl
WWW: https://th.if.uj.edu.pl/~adamr/

Kraków, 20 lipca 2023

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Adama Kłosińskiego: "Orbital effects in elemental chalcogens"

Recenzowana rozprawa doktorska została wykonana w Katedrze Fizyki Materii Skondensowanej Instytutu Fizyki Teoretycznej Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego, a jej promotorem jest dr hab. Krzysztof Wohlfeld, prof. UW.

Rozprawa została napisana w całości w języku angielskim i ma formę klasyczną, tj. zwartego tekstu podzielonego na pięć rozdziałów, o łącznej objętości 106 stron. Rozprawę poprzedza licząca pięć pozycji lista publikacji, których współautorem jest doktorant, zamyka zaś jednostronicowy dodatek zawierający tabelę akronimów użytych w tekście głównym oraz spis literatury cytowanej, liczący 66 pozycji.

Zasadniczym celem, któremu podporządkowana jest struktura pracy, jest prezentacja oryginalnych wyników doktoranta, dotyczących struktury elektronowej jednowymiarowych łańcuchów utworzonych z atomów selenu lub telluru, które zostały opublikowane w dwóch pracach: A. Kłosiński, A. M. Oleś, C. E. Agrapidis, J. van Wezel, and K. Wohlfeld, *Chalcogenic orbital density waves in the weak- and strong-coupling limit*, Phys. Rev. B **103**, 235123 (2021), oraz A. Kłosiński, W. Brzezicki, A. Lau, C. E. Agrapidis, A. M. Oleś, J. van Wezel, and K. Wohlfeld, *Topology of chalcogen chains*, Phys. Rev. B **107**, 125123 (2023). Elementami nowatorskimi opisanych badań są, po pierwsze: zastosowanie wielorbitalowych hamiltonianów typu Hubbarda, które bez wątpienia opisują strukturę elektronową dokładniej niż prostsze modele typu ciasnego wiązania; po drugie zaś: wykorzystanie nowoczesnych metod obliczeniowych, z grupą renormalizacji macierzy gęstości (ang. *Density Matrix Renormalization Group* – DMRG), w miejsce używanych w starszej literaturze przybliżeń typu pola średniego

(chociaż wyniki otrzymane w ramach przybliżenia pola średniego są także przytoczone w pracy, jako niezbędne dla celów porównawczych). Od strony wyboru tematyki i warsztatu, praca bez wątpienie należy zatem do głównego nurtu współczesnych badań w obszarze fizyki materii skondensowanej. (Wyniki przesądzające o wartości naukowej pracy omówię bardziej szczegółowo w dalszych częściach recenzji.)

Główny tekst rozprawy otwiera Wprowadzenie (*Introduction*), w którym autor zawarł znakomity, a przy tym bardzo zwięzły (4 strony) miniwykład prezentujący — w stylu popularnonaukowym — hierarchię kolejnych czynników determinujących własności pierwiastków w formie krystalicznej, w szczególności to, czy są one przewodnikami czy też izolatorami elektrycznymi. Wskazany łańcuch przyczyn rozpoczyna się od symetrii orbitali walencyjnych i liczby elektronów na tych orbitalach, kończy zaś na wpływie pola krystalicznego i sprzężenia typu spin–orbita. Szkoda, że nie wspomniano wprost o roli ekranowania jądra przez elektrony z powłok wewnętrznych, który to efekt odpowiada (przynajmniej w przeważającej mierze) za rozszczepienie podpowłok przyporządkowanych różnym wartościom pobocznej liczby kwantowej. Dalej, autor podaje esencjonalne charakterystyki podstawowych metod obliczeniowych chemii kwantowej i fizyki układów wielu ciał, wskazując na rolę korelacji elektronowych i orbitalnych stopni swobody w opisie pierwiastków bloku d oraz f. Wprowadzenie zamyka omówienie struktury dalszych części rozprawy.

Kolejne cztery rozdziały stanowią pary, w każdej z których pierwszy rozdział zawiera informacje wprowadzające, konieczne do zrozumienia wyników zaprezentowanych w rozdziale po nim następującym.

I tak, Rozdział 2. (*Preliminaries*) wskazuje przesłanki przemawiające za wyborem takiej, a nie innej, postaci hamiltonianu przybliżonego opisującego zachowanie elektronów wędrownych w chiralnym łańcuchu utworzonym z atomów cięższych pierwiastków należących do grupy 16. (lub VIA) układu okresowego, czyli chalkogenów (tutaj będzie to selen i tellur). Podkreślono w szczególności, że trójwymiarowa struktura krystalicznego selenu, jak również telluru, zawiera słabo sprzężone łańcuchy atomowe, dlatego rozważania układu jednowymiarowego są uzasadnione, oraz że stan podstawowy takiego łańcucha wykazuje porządek orbitalny w postaci tzw. orbitalnych fal gęstości (ang. *orbital density waves* – ODW). Zaprezentowano także pokrótce uproszczone, rozważane wcześniej w literaturze wersje hamiltonianu (w szczególności dla tzw. fermionów bezspinowych).

Kolejny Rozdział 3. (*Orbital density waves in chalcogen chains*) prezentuje wyniki uzyskane przez doktoranta a zawarte w przywołanym wyżej artykule z Physical Review B (rok 2021). Opisane badania dotyczą wpływu międzyorbitalowego odpychania kulombowskiego, czyli odpychania elektronów obsadzających różne orbitale na tym samym węźle, na uporządkowanie stanu podstawowego łańcucha chalkogenowego. Rozważania prowadzone są tutaj w ramach uproszczonego modelu dla bezspinowych fermionów, dla którego wymiar przestrzeni Hilberta ulega znaczącej redukcji. Jak pokazali wcześniej inni autorzy, wspomniane oddziaływanie międzyorbitalowe prowadzi do niestabilności zarówno w przypadku sieci kubicznej jak i prostych (tj. niechiralnych) łańcuchów. Z kolei dla łańcuchów chalkogenowych, jak pokazał doktorant ze współpracownikami, podobne niestabilności nie pojawiają się dla realistycznych wartości oddziaływania, a czynnikiem stabilizującym jest obecność przerwy energetycznej.

Podobnie, Rozdział 4. (*Interlude: One-dimensional topological insulators*) przybliża pojęcie izolotorów topologicznych oraz ich jednowymiarowych odpowiedników, a także model Su-Schrieffera-Heegera w jednym wymiarze i własności jego szczególnych stanów własnych, zlokalizowanych na końcach układu.

Rozdział 5. (*Topology of chalcogen chains*) referuje wyniki otrzymane w ramach realistycznego modelu łańcucha chalkogenowego, z uwzględnieniem spinu 1/2 i sprzężenia spin–orbita, opisane w drugim z przywołanych wyżej artykułów (z roku 2023). Doktorant pokazuje, że rozważany model posiada stany nietrywialne topologicznie, zlokalizowane na końcach, których występowanie można powiązać z dyskretną symetrią hamiltonianu (ze względu na obrót o 180 stopni). Autor rozprawy podaje także klasyfikację wspomnianych stanów ze względu na niezmienniki topologiczne i wyraża przypuszczenie, że będą one miały swoje odpowiedniki powierzchniowe w rzeczywistym układzie złożonym ze słabo sprzężonych łańchuchów. Stany brzegowe wykazują specyficzną właściwość która polega na tym, że funkcja falowa znika na co trzecim węźle (licząc od brzegu). Pojawia się jednak pytanie: *Czy własność ta nie jest związana z uproszczeniami przyjętymi w modelu, a dokładniej, czy nie zaniknie po uwzględnieniu całek przeskoku pomiędzy bardziej odległymi węzłami?*

Niewątpliwą zaletą przedstawionej mi do oceny rozprawy jest duża dokładność, z jaką doktorant badał opisane zagadnienia szczegółowe, która przejawia się drobiazgowych porównaniach wyników uzyskanych różnymi metodami. Warto także podkreślić, że doktorat jest starannie napisany, błędy literowe niemal w nim nie występują, a pomimo zwartej struktury nie jest nadmiernie nasycony żargonem

technicznym co sprawia, że jego obszerne fragmenty mogą być zrozumiałe dla fizyków nie specjalizujących się w teorii materii skondensowanej. Zapewne, dobrą decyzją było ograniczenie prezentacji do wyników dwóch najważniejszych artykułów z dorobku doktoranta, co ułatwiło drobiazgowe dopracowanie tekstu rozprawy.

W podsumowaniu uważam, że przedłożona mi do oceny rozprawa spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane pracom doktorskim, zaś doktorant posiada ponadprzeciętne osiągnięcia naukowe, które udokumentowane są w szczególności publikacjami w bardzo dobrych czasopismach fizycznych. Wnoszę zatem o dopuszczenie mgr. Adama Kłosińskiego do dalszych etapów postępowania doktorskiego.

Z uwagi na fakt, że dorobek publikacyjny doktoranta jest ponadprzeciętny (cztery artykuły opublikowane w Physical Review B; piąty artykuł dostępny – póki co – jako preprint w bazie *ArXiv* z pewnością ukaże się drukiem w niedługim czasie; we wszystkich przypadkach lista autorów jest krótka a doktorant zajmuje na niej jedno z dwóch pierwszych miejsc) **proponuję także rozważenie mojego wniosku o wyróżnienie rozprawy doktorskiej**. W uzasadnieniu warto podkreślić, że opisane w rozprawie wyniki doktoranta dotyczą aktualnej i ważnej tematyki badań w obszarze fizyki materii skondensowanej, gdyż stany topologicznie chronione mogą stanowić wartościową alternatywę dla obecnie istniejących realizacji bitów kwantowych (kubitów), zaś otrzymanie interesujących wyników w ramach rozważań własności czystych pierwiastków jest nieoczekiwane i może zainspirować dalsze prace badawcze. Na uznanie zasługuje także biegłe opanowanie współczesnych metod obliczeniowych, odpowiednich dla układów niskowymiarowych i wnikliwa analiza wyników zaprezentowana w sposób zwięzły.

Prof. Adam Rycerz