Kraków, 2024-12-16

dr hab. Michał Rams, prof. UJ
Instytut Fizyki, Uniwersytet Jagielloński
ul. Łojasiewicza 11, 30-348 Kraków
tel. 012 663 4515, m.rams@uj.edu.pl

Recenzja osiągnięć naukowych doktora Oresta Pavlosiuka w związku z postępowaniem w sprawie nadania mu stopnia doktora habilitowanego

Przedstawiony we wniosku dr. Oresta Pavlosiuka wykaz osiągnięć naukowych zawiera cykl wybranych publikacji, oznaczonych tam H1–H8, pod zbiorczym tytułem *Właściwości magneto-transportowe wybranych semimetali topologicznych*. Wszystkie publikacje wchodzące w skład tego cyklu relacjonują eksperymentalne badania takich związków metalicznych, które są uznawane lub sugerowane jako będące materiałami topologicznymi. Pomiary własności magneto-transportowych pozwalają lepiej zrozumieć mechanizmy przewodnictwa i ich związek z detalami struktury elektronowej, poprzez porównanie wyników eksperymentalnych z literaturowymi teoriami transportu elektronowego oraz z obliczeniami ab initio. W ten sposób przeprowadzone eksperymenty i analiza otrzymanych wyników jest testem czy dany związek faktycznie jest takim niezwykłym materiałem.

Praca H1 [Sci. Rep. 7 (2107) 12822] dotyczy badania detali powierzchni Fermiego antymonku lutetu, LuSb, związku który ma prostą strukturę krystaliczną typu NaCl. Motywacją do takich badań były doniesienia w latach 2014-16 autorstwa innych grup, że kilka analogicznych związków lantanowców wykazuje ekstremalnie duży magnetoopór oraz indukowane polem magnetycznym plateau oporności elektrycznej, które to cechy są charakterystyczne dla semimetali topologicznych. W ramach badań opisanych w H1, habilitant wyhodował monokryształy LuSb wykorzystując jako topnik Sn, sprawdził czystość otrzymanych kryształów i wykonał pomiary magneto-transportowe. O ile zależność oporu od temperatury w zerowym polu jest typowa dla metali, to magnetorezystancja w niskich temperaturach w 9 T faktycznie osiąga ekstremalną wartość 30. Moją uwagę w tej pracy zwróciły pomiary oscylacji Shubnikova–de Haasa (SdH) wykonane dla 10 różnych kątów przyłożenia pola magnetycznego, co dało informację o przekrojach powierzchni Fermiego w różnych kierunkach. Pozwoliło to potwierdzić detale powierzchni Fermiego otrzymane w obliczeniach struktury elektronowej (wykonanych przez drugiego współautora tej publikacji).

Praca H2 [Phys. Rev. B 97 (2018) 235132] opisuje własności bizmutku lutetu, LuBi, i bizmutku itru, YBi, które również mają strukturę NaCl i podobne zachowanie magnetorezystancji jak LuSb. Habilitant wyhodował kryształy, wyciął próbki i wykonał pomiary magnetorezystancji, która jest nawet wyższa niż dla poprzedniego związku, a opór poniżej 10 K ma plateau zależne of pola. Obliczenia ab-initio są w publikacji korelowane z analizą oscylacji SdH. Struktura elektronowa jest niemal identyczna dla obu związków i wskazuje na ich półmetaliczny charakter z niemal idealną kompensacją nośników: elektronów i dziur. Autorzy wyciągają wniosek, że obserwowane własności są konsekwencją tej kompensacji, a nie możliwej nietrywialnej topologii stanu elektronowego.

Praca H3 [Sci. Rep. 13 (2023) 22776] dotyczy analogicznych związków bizmutu, ale z dysprozem oraz holmem, które mają duże momenty magnetyczne. Związki te porządkują się antyferromagnetycznie co wpływa na opór elektryczny, ale niezależnie od tego mają ekstremalnie dużą magnetorezystancję. Habilitant dla tych dwu związków nadzorował hodowlę kryształów, uczestniczył w pomiarach magnetorezystancji w polach do 14 T. Dodatkową nietypową cechą tych

związków jest temperaturowa zależność koncentracji nośników w niskich temperaturach, związana ze zmianami rozmiarów powierzchni Fermiego, co w wynikach autorów potwierdza zarówno brak skalowania Kohlera (MR vs B/ρ_0 dla różnych T) jak i pomiary efektu Halla i oscylacji SdH. W tej publikacji habilitant przejął rolę autora korespondencyjnego, jak również był promotorem pracy dyplomowej pierwszej autorki, co pokazuje jego rozwój w organizacji i podziale ról przy prowadzeniu badań naukowych.

Inspiracją badań przedstawionych w pracach H4–H6 były m.in. doniesienia z 2018 roku o własnościach GdPtBi, w którym zaobserwowano ujemną magnetorezystancję, interpretowaną jako skutek istnienia węzłów Weyla. Znalezienie i badania semimetali, w których wzbudzenia kwazicząstek byłyby analogami fermionów Weyla z kwantowej teorii pola, jest współczesnym wyzwaniem fizyki materii skondensowanej. Publikacje H4–H6 dotyczą trójskładnikowych związków określanych jako half-Heusler, izostrukturalnych z GdPtBi. Pierwsza z nich, oznaczona we wniosku H4 [Phys. Rev. B 99 (2019) 125142] dotyczy DyPdBi. Habilitant przygotował kryształy takiego związku i wykonał pomiary magneto-transportu (magnetorezystancję i efekt Halla), uwzględniając również anizotropię tych własności. Wymagało to wykonania pomiarów nie tylko w zależności od (H, T), ale również dla różnych kątów θ pomiędzy kierunkami prądu i pola magnetycznego, wykorzystując możliwość obracania próbki w aparaturze pomiarowej. Wykonał również analizy tych pomiarów i przygotował wszystkie wykresy w tej publikacji. Te analizy dowodzą, że DyPdBi ma charakterystyczne cechy semimetalu Weyla: ujemny magnetoopór wzdłużny i planarny efekt Halla. Zachowanie poprzecznego magnetooporu jest bardzo podobne jak podłużnego, podobnie jak w GdPtBi. Jednak zależność współczynnika Halla od pola jest już odmienna niż w GdPtBi. Ponadto zmierzona zależność planarnego efektu Halla od temperatury i pola jest niemonotoniczna. Na uznanie zasługuje staranność wykonywania pomiarów, na przykład testy wpływu umiejscowienia kontaktów napięciowych na próbce (Fig.S2) na wyniki magnetotransportu.

Kolejna publikacja H5 [APL Materials 8 (2020) 111107] dotyczy dwu związków: TbPtBi oraz HoPtBi o podobnych własnościach jak poprzedni. Pomiary magnetotransportowe poprzedzają pomiary magnetyczne i ciepła właściwego w których widać temperatury porządkowania się magnetycznego, które to oczywiście wpływa również na analizowany dalej opór elektryczny. Same pomiary magnetorezystancji w funkcji H, T, oraz dla różnych wartości θ pokazują przejście od dodatniej do ujemnej anizotropowej magnetorezystancji nawet w 300 K, co widać na mapie wyników (Fig.9 w H5). Analiza oscylacji SdH dla HoPtBi, wskazuje na istnienie dwóch częstości oraz na stosunkowo małe masy efektywne nośników. W tej publikacji habilitant był również autorem korespondencyjnym, a podczas tych badań był opiekunem pracy inżynierskiej współautora.

Czwarty przedstawiany przez habilitanta związek o strukturze typu half-Heusler to ScPtBi (publikacja H6 [Physical Review B 103 (2021) 205127]), który w przeciwieństwie do poprzednich jest niemagnetyczny. Z wyhodowanych kryształów wycięto próbki i wykonano serie pomiarów magnetotransportowych. Uzyskane wyniki są charakterystyczne dla chiralnej anomalii magnetycznej (unikalej własności semimetali topologicznych): planarny efekt Halla występuje jednocześnie z ujemną magnetorezystancją, a kątowa zależność anizotropowej magnetorezystancji ma szczególną postać. Publikacja zawiera również obszernie opisane wyniki obliczeń struktury elektronowej, ale jak rozumiem tą część wykonał inny współautor. Pomiary wykonane z użyciem chłodziarki rozcieńczalnikowej do PPMS pokazują dwustopniowe przejście poniżej 0.7 K do stanu nadprzewodzącego, czego nie potwierdzją pomiary ciepła właściwego.

Dwie ostatnie publikacje z cyklu dotyczą magneto-transportu w układach określanych w publikacjach innych grup jako semimetale Diraca drugiego rodzaju. Pierwsza z nich, oznaczana we wniosku jako H7 [Sci. Rep. 8 (2018) 11297], przedstawia dogłebne badania magnetotransportu

w $PtTe_2$. Kryształy tych związków były zrobione używając Te jako topnika, a ich struktura krystaliczna pozwala na łatwe uzyskanie bardzo cienkich próbek w płaszczyźnie *a–b*. Pomiary magnetorezystancji wykonane na tak przygotowanych próbkach pokazują, że choć niektóre własności są charakterystyczne dla semimetali topologicznych, to inne nie są, np. zachodzi skalowanie Kohlera (krzywe MR vs B/ρ_0 dla różnych T pokrywają się). Ponieważ oscylacje SdH pokazuję istnienie dwu częstości (co jest subtelnym efektem ledwie widocznym na rys 4. w tej publikacji), autorzy wnioskują że za dużą magnetorezystancję odpowiada dwupasmowe przewodnictwo, bez potrzeby istnienia nietrywialnych stanów topologicznych. Z oscylacji SdH wyznaczono również fazy Berry'ego dla obu pasm, a otrzymane wyniki poddają w wątpliwość wcześniejsze doniesienia z 2017 roku.

Ostatnia praca z cyklu H8 [Phys. Rev. B 105 (2022) 075141] dotyczy dwu innych zwiazków które mogą być semimetalami Diraca drugiego rodzaju: $MoSi_2$ oraz WSi_2. W odróżnieniu od pozostałych prac, do hodowli tych kryształów została użyta metoda Czochralskiego. Struktura krystaliczna jest tetragonalna. Habilitant przeprowadził skrupulatne badania właściwości transportu elektronów oraz pomiary magnetostrykcji, jak również analizę tych wyników. Wykonane przez współautora publikacji obliczenia struktury pasmowej pomogło rozwiązać niezgodności z wcześniejszych raportów na ten temat. Okazało się, że obserwowany ekstremalnie duży magnetoopór wynika z kompensacji dwu pasm dziurowego i elektronowego. Potwierdziły to pomiary efektu Halla. Pomiar oscylacji SdH wykonany do 14 T pozwolił wyznaczyć 5 różnych częstości dla WSi_2 i 7 dla $MoSi_2$ (Fig. 3 w H8), których zależności autorzy również wyjaśnili. Na koniec oscylacje SdH zmierzone dla różnych kątów θ pozwoliły wyznaczyć ekstremalne przekroje powierzchni Fermiego, co autorzy porównali z wynikami obliczeń ab initio.

Badania przedstawione w całym cyklu publikacji H1–H8 wymagały uzyskania dużych kryształów wytypowanych wcześniej związków międzymetalicznych, bo tylko dla dobrej jakości monokryształów można ekperymentalnie wydzielić subtelne efekty w oporze elektrycznym i wyciągać z nich wnioski o kształcie powierzchni Fermiego. Uzyskanie odpowiedniej jakości próbek jest bardzo istotnym osiągnięciem habilitanta w przedstawionych publikacjach, bez którego dalsza część badań wogóle nie mogłaby być prowadzona. Później, samo zrobienie 6 kontaktów elektrycznych na miniaturowej próbce, która ma największy rozmiar rzędu 1 mm (patrz np. rys. S5 w H5), wymaga sporych zdolności manualnych, staranności i precyzji. Wykonanie całych serii pomiarów wymaga, oprócz umiejętności obsługi delikatnej aparatury i poświęconego czasu, również dobrego planowania i zrozumienia co się chce sprawdzić. Analiza tych danych i ich interpretacja nie jest prostym zadaniem, bo generalnie struktury elektronowe są skomplikowaną koncepcją, opór elektryczny może być efektem transportu elektronów w kilku pasmach, a dodatkowo wpływa na niego rozpraszanie na fononach, momentach magnetycznych i domieszkach. Poszczególne prace w zależności od potrzeb wykorzystywały modele i równania uwzględniające te różne podstawowe procesy, jak i bardziej zaawansowane modele w analizie kwantowych oscylacji SdH i testowaniu postulowanej topologiczności struktur. Dla części z prezentowanych związków precyzyjna analiza pokazała, że wbrew wcześniejszym doniesieniom lub oczekiwaniom, obserwowany ekstremalny magnetoopór nie jest wynikiem jakiejś szczególnej topologii w strukturze elektronowej, ale rezultatem kompensacji nośników z różnych pasm tworzących powierzchnię Fermiego. Wykonanie takich analiz przez habilitanta, jak i przygotowanie sporych części tekstów publikacji dowodzi że zna on aktualne teorie transportu elektronowego w tych układach i ma dobre rozeznanie w temacie właściwości transportowych semimetali.

Tematyka naukowa, której dotyczą publikacje z cyklu jest bardzo świeża i jest w niej światowa konkurencja, co widać np. po przeglądzie referencji cytowanych we wstępach do tych publikacji.

Są to raporty od czołowych światowych grup (np. Robert Cava z Princeton), opublikowane często zaledwie rok, dwa lata przed ukazaniem się danej publikacji H1–H8. To, że wyniki habilitanta są cenne, widać zarówno po tym, że zostały opublikowane w dobrych czasopismach, a jeszcze wyraźniej po tym, że te publikacje były cytowane już około 140 razy w momencie składania wniosku. Wszystkie powyższe publikacje H1–H8 ukazały się w Phys.Rev.B, Scienfic Reports lub APL Materials, których współczynnik wpływu jest od 3.5 do 5 i które znajdują się w odpowiednim wykazie czasopism zgodnie z wymogami ustawy.

Publikacje z cyklu powstawały w bardzo małej grupie, mają od 2 do 5 współautorów. Pan Pavlosiuk jest pierwszym autorem w 7 z tych publikacji, a w 5 był autorem korespondencyjnym, co podkreśla jego znaczącą rolę w tych badaniach. Oprócz habilitanta autorami są prof. Dariusz Kaczorowski oraz prof. Piotr Wiśniewski, który był wcześniej promotorem doktoratu habilitanta, oraz pojedynczo inne osoby. Niewątpliwie praca pod kierunkiem znakomitych i aktywnie działających mentorów pomaga habilitantowi w jego rozwoju naukowym.

Udział habilitanta w ekperymentalnej części tych prac wg oświadczenia autora obejmował hodowlę wielu dobrej jakości monokryształów badanych związków, m.in.: LuSb, LuBi, YBi, DyPdBi, ScPtBi. Dla prawie wszystkich związków opisywanych z pracach H1-H8 wykonał pomiary oporu elektrycznego w funkcji pola magnetycznego i temperatury, a czasem również w funkcji kąta, pomiary efektu Halla, a w zależności od tematu i potrzeby wykonał również pomiar magnetostrykcji, ciepła właściwego oraz magnetyzacji. Oprócz tego robił analizy wykonanych przez siebie pomiarów, przygotował wyniki w postaci wykresów, wniosków i rysunków do publikacji, w części tych prac przygotował szkic manuskryptu, brał udział w dyskusjach nad wynikami. Oświadczenia współautorów, m.in. prof. Dariusza Kaczorowskiego oraz prof. Piotra Wiśniewskiego, są zgodne z tym oświadczeniem habilitanta, jak również zgodne z tym są paragrafy authors contributions zawarte w kilku z publikacji H1–H8. Prace H1–H8 są datowane od 2017, a więc po uzyskaniu stopnia doktora, który to habilitant uzyskał w 2016. Obecna ustawa, wg jej objaśnień w poradniku RDN, nie wymaga, żeby osiągnięcie naukowe do habilitacji było niezależne od pracy doktorskiej.

Pytania jakie nasuwają mi się po lekturze tego cyklu publikacji nie mają charakteru polemiki, a w jedynie wynikają z ciekawości. Jak decyduje się o parametrach syntezy kryształów z topnika, np. o zakresach temperatur, bo nie zawsze chyba są znane diagramy fazowe dla takich układów trójskładnikowych. Czy powstają w takich syntezach jednocześnie inne fazy i jaki jest success rate otrzymania kryształów wystarczająco dużych do pomiarów transportowych. Przy jednym związku z prac H1-H8 jest informacja, że powstałe kryształy na powietrzu są nietrwałe. Jak w takim przypadku np. robi się kontakty elektryczne? Ponadto ciekawi mnie czemu w przypadku publikacji H4 i H5 nie zawarto obliczeń struktury elektronowej, w przeciwieństwie do pozostałych publikacji. Czy coś utrudnia wykonanie takich obliczeń, czy też autorzy nie widzieli takiej potrzeby w tym przypadku.

Cały dorobek naukowy habilitanta obejmuje razem 32 publikacji, z tego 24 po uzyskaniu stopnia doktora. Prawie wszystkie te prace prezentuja badania wykonane tym samym instytucie i dotyczą własności magnetycznych i elektrycznych związków metalicznych. W tej grupie są liczne związki zawierających lantanowce, ale również izolator topologiczny Bi_2Se_3, czy domieszkowane jonami ziem rzadkich fluorki w postaci nanokryształów. Ten ostatni projekt zrealizowany był zupełnie innej grupie naukowców niż prace H1-H8. Razem, publikacje habilitanta cytowane były około 580 wg bazy Web of Science w okresie powstawania tej recenzji, co jest bardzo dobrym wynikiem bibliometrycznym na tym poziomie kariery naukowej i biorąc pod uwagę, że pierwsza z tych publikacji powstała zaledwie 13 lat temu.

W 2023 roku habilitant uzyskał stypendium Bekkera NAWA i spędził 4 miesiące pracując w

Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids w Dreznie w grupie prof. Yuriego Grina. Zajmował się tam hodowlą kryształów nowych związków, testami ich jakości i wyznaczaniem struktur krystalicznych nowych faz – według załączonej do wniosku opinii prof. Grina. Habilitant spełnia w ten sposób warunek istotnej aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej instytucji naukowej, w szczególności w zagranicznej. Szeroka współpraca zagraniczna jest również widoczna w licznych publikacjach habilitanta spoza wybranego cyklu. Aktywność naukowa widoczna jest również w kilkunastu aktywnych udziałach w konferencjach naukowych, m.in. wystąpieniu ustnym na konferencji The European Conference Physics of Magnetism w Poznaniu w 2023. Oprócz bycia wykonawcą w licznych projektach kierowanych przez mentorów, tuż przez złożeniem swojego wniosku habilitant pozyskał fundusze w konkursie NCN Sonata na samodzielny projekt badawczy.

Osiągnięcia habilitanta, w szczególności przedstawione w cyklu publikacji eksperymentalne badania struktury elektronowej i transportu elektronowego w kryształach, stanowią znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne. Publikacje z cyklu są tematycznie i logicznie bardzo dobrze powiązane. Poszczególne publikacje wskazują na oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, którym jest wyjaśnienie mechanizmów odpowiedzialnych za właściwości magneto-transportowe w kryształach uważanych za potencjalne materiały topologiczne.

Podsumowując, w mojej ocenie, osiągnięcia dr. Oresta Pavlosiuka zatytułowane *Właściwości magneto-transportowe wybranych semimetali topologicznych*, przedstawione mi do recenzji w postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dyscyplinie nauki fizyczne, z nadmiarem odpowiadają wymaganiom określonym w art. 219 ust. 1 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, Dz.U.2023.742.

Michał Rams

Electronically signed by
Michał Leon Rams
16.12.2024
11:37:31 +01'00'