Leiden 23.01.2024 r.

Uniwersytet Warszawski

Prof. Jakub Tworzydło

+48-225532919; jakub.tworzydlo@fuw.edu.pl

ulica Pasteura 5, 02-093 Warszawa, Polska

FACULTY OF PHYSICS
UNIVERSITY OF WARSAW

Recenzja rozprawy doktorskiej
magistra Michała Kupczyńskiego
pt. „Many body effects in topological materials and structures"

Praca doktorska mgr. Michała Kupczyńskiego została przygotowana w języku angielskim. Praca liczy blisko 160 stron pełnego formatu A4, zawiera 360 odnośników literaturowych, ilustrowana jest 63 rysunkami. Rozmiar manuskryptu jest zatem bardzo obszerny, jak na prace doktorskie z dziedziny fizyki teoretycznej materii skondensowanej. Praca opatrzona jest dodatkowo streszczeniem w języku polskim i angielskim, oprócz spisu treści autor przygotował także oddzielny spis rysunków i skorowidz stosowanych skrótów.

Struktura pracy jest przemyślana, materiał przedstawiony jest w sposób logiczny, równomiernie rozłożony pomiędzy rozdziałami. Pracę otwiera wstęp ogólny (rozdz. 1), po nim następuje teoretyczne wprowadzenie do topologicznych stanów materii (rozdz. 2) i formalnych narzędzi koniecznych w ich opisie. Wprowadzone zostają niezbędne pojęcia takie, jak: faza geometryczna, niezmienniki topologiczne, izolatory Cherna i ułamkowe izolatory Cherna, a także zerowe mody Majorany. W rozdz. 3 autor przedstawia specyficzne dla pracy narzędzia teoretyczne i metodologię badań, oraz w szczegółach omawia metody numeryczne użyte do uzyskania większości oryginalnych wyników badawczych. W rozdz. 4 autor wprowadza i szczegółowo dyskutuje własności szeregu modeli sieciowych, które używane są w specjalistycznej literaturze dotyczącej izolatorów Cherna oraz ułamkowych izolatorów Cherna.

Całość pracy robi wrażenie dobrze przemyślanej i zaplanowanej. W części wstępnej zostały systematycznie wprowadzone pojęcia konieczne do opisania części badawczej pracy. Metody i narzędzia teoretyczne także zostały ujęte w sposób wyczerpujący.

Wyniki oryginalnych badań doktoranta są opisane w kolejnych dwu rozdziałach. Rozdz. 5 dotyczy identyfikacji różnych faz, zarówno nieściśliwych faz typu ułamkowego kwantowego efektu Halla (FQHE), jak i faz zawierających korelacje ładunkowe, a być może nawet uporządkowanie typu kryształu Wignera (WC). W rozdz. 6 rozpatrywane są różne układy, w ramach podejścia metody ciasnego wiązania z indukowanym nadprzewodnictwem, w celu identyfikacji stanów związanych Majorany. Szczegółowo dyskutowane są kolejno, w porządku rosnącej trudności, modelowy układ w jednym wymiarze, dwu wymiarach, i bardziej realistyczny model nano-drutu, w pełni trójwymiarowy.

Część badawcza pracy, oparta na uzyskanych przez doktoranta wynikach i częściowo na opublikowanych oryginalnych pracach badawczych, jest z pewnością wystarczająco obszerna, aby udokumentować umiejętności kandydata w uzyskiwaniu ciekawych wyników naukowych.

Ocena części wstępnej pracy.

Część ściśle wstępna pracy obejmuje rozdz. 1, 2 i 3. Autor porusza wyczerpująco wiele ważnych osiągnięć z teorii stanów topologicznych materii. Przede wszystkim zamieszcza przeglądowy, ale spójny i zwarty opis zjawisk fizycznych takich jak: stany kwantowego efektu Halla całkowito-liczbowego i ułamkowego, stany krawędziowe izolatorów topologicznych, mody zerowe Majorany, kryształ Wignera etc. Przechodzi następnie do, obszerniejszego niż można by oczekiwać, wprowadzenia matematycznego prowadzącego do teorii wiązek włóknistych i definicji klas Cherna na gruncie topologii algebraicznej.

Wprowadzenie matematyczne jest zaskakująco dokładne, choć nie wolne od błędów edytorskich (np. błąd w zapisie twierdzenia Stokesa w postaci (2.45)). Oprócz wprowadzenia aparatu abstrakcyjnego, rozważanie jest doprowadzone do wyników mających zastosowanie w analizach fizycznych. Wyniki matematyczne dotyczące postaci koneksji na wiązce włóknistej (z rozdz. 2.1.3) są przywołane w rozdziale 2.2.2 podczas wyjaśniania kluczowej w teoriach fizycznych koneksji i krzywizny Berry’ego. Podobnie wyniki matematycznej klasyfikacji Cherna (rozdz. 2.1.4) są przywołane w rozdz. 2.2.4 aby domknąć związek pierwszej liczby Cherna z kwantyzacją przewodnictwa Halla.

Warto też zauważyć, że dojrzałością teoretyczną, zaawansowanym wyprowadzeniem i ciekawym wynikiem oryginalnym odznacza się rozdział 2.8.2. Wskazując na możliwe zastosowania modów Majorany do obliczeń kwantowy autor dyskutuje szczegółowy protokół splatania czterech stanów związanych Majorany w modelowej geometrii „litery H”. Wyniki zreferowane są równolegle do oryginalnej pracy współautorstwa kandydata (Phys. Rev. B z 2020 roku).

Część wstępna pracy dokumentuje zatem bardzo dobre opanowanie teoretycznych zagadnień, dążenie do pogłębionego zrozumienia przedstawianych pojęć i metod, a także elementy oryginalnego ujęcia. W pełni wyczerpuje zwyczajowe wymagania biegłości metodologicznej i teoretycznego opanowania dziedziny (własności topologicznych faz materii skondensowanej), w której to materii porusza się kandydat.

Opis części badawczej pracy.

Rozdz. 4 ma charakter przejściowy między częścią wprowadzającą a wynikami badań. Autor podaje ilościowe wyniki dla kilku modeli (modelu Haldane’a, sieci Kagome, sieci Lieba, trójkątnej i zredukowanego modelu Hofstadtera), badając ich strukturę pasmową. Celem jest uzyskanie płaskiego pasma i w miarę równomiernej krzywizny Berry’ego w całej strefie Brillouina, także przy wyższych liczbach Cherna. Modele znane są z literatury, ale przedstawione wykresy zawierają wyniki własnych obliczeń autora.

W części badawczej pracy kandydata interesują zależności pomiędzy występowaniem fazy typu krystalicznego a fazy typu cieczy topologicznej w układach oddziałujących fermionów (bez spinu) na sieciach z topologicznymi pasmami płaskimi. W badaniu szczegółowym modelowane jest przejście między fazą kryształu Wignera (WC) a izolatorem Cherna o ułamkowym ładunku (FCI) w różnych modelach sieci. Autor wykorzystuje modele ciasnego wiązania na sieciach z płaskimi pasmami o różnych liczbach Cherna ($C=1$ i $C=2$), szerzej omówione w rozdz. 4.1. Ostatecznie badanie z rozdz. 5 eksploruje stabilność faz WC i FCI przy niskiej gęstości (współczynniki napełnienia $\nu = 1/5$, $1/7$ i $1/9$) w modelach sieci Kagome, trójkątnej oraz Hofstadtera.

Jako podstawowej metody autor używa ścisłej diagonalizacji układów skończonych, o niewielkich rozmiarach. Obecność periodycznych warunków brzegowych pozwala na jednoznaczną identyfikację stanów podstawowych analogicznych do występujących w cieczach kwantowych FQHE. Wstępne wyniki badań, dla modelu na sieci Kagome (C=1), przy współczynnikach wypełnienia $\nu = 1/3$, $1/5$, $2/5$ są przedstawione w rozdz. 4.2. Istotnym narzędziem służącym do identyfikacji FCI są reguły zliczania dozwolonych kwazi-pędów (wprowadzone w części wstępnej pracy 3.4.1), pozwalające ujawnić charakterystyczne wzorce analogicznie jak dla stanów FQHE.

Następnie rozważany jest ten sam model, przy współczynniku wypełnienia $\nu = 1/7$ i rozmiarze siatki 5x7 (rozdz. 4.3, rozdz. 5.1 i rozdz. 5.2.1). Zostaje też dokonane porównanie zależności rozmiarowych z siatkami 4x7 i 6x7 (rozdz. 5.2.1). Badanie zostaje wykonane przy zmieniającym się bezwymiarowym parametrze α charakteryzującym zasięg (ekranowanego) oddziaływania kulombowskiego. Charakterystyki przejścia pomiędzy fazą WC oraz FCI zostają ujęte ilościowo przy pomocy tzw. siły krystalizacji W, wartości całki przykrycia O ze stanem FQHE oraz charakterystyk spektrum splątania. Dla rozważanego przypadku wypełnienia $\nu = 1/7$ udaje się pokazać, że wzrost zasięgu oddziaływania wzmacnia charakterystyki typowe dla fazy WC, natomiast dla krótszych zasięgów oddziaływania wyraźnie pojawiają się fazy FCI.

Podjęte w kolejnych podrozdziałach (obszerny rozdz. 5.3) badania sieci w modelach pasmowych z C=2 nie przynoszą konkluzywnych rozstrzygnięć. Wydaje się, na podstawie porównania z wynikami z $\nu = 1/5$ i na sieci Kagome C=1 (rozdz. 5.3.1), że stany FCI przy wyższej liczbie Cherna C=2 są mniej podatne na formowanie się porządku krystalicznego. Posługując się intuicją fizyczną, wskazującą na formację faz WC w mniejszych gęstościach elektronowych, autor przechodzi do badania modeli przy zapełnieniu $\nu = 1/9$ w pasmach z C=2. W tym reżimie parametrów sama faza FCI staje się niestety mniej wyraźna, ponadto pojawiają się cechy współistnienia fazy FCI oraz fazy WC. Wydaje się, że dowodów na obecność wyraźnej, wyizolowanej fazy krystalicznej WC w pasmach z C=2 nie udało się osiągnąć.

Nie jest dla mnie jasne, dlaczego autor analizując pasma z C=2 (rozdz. 5.3) porzuca model sieci Kagome, prezentowane są wyniki jedynie dla modelu Hofstadtera i sieci trójkątnej (przy C=2). Jeśli powodem są trudności obliczeniowe akurat dla tego rodzaju sieci przy C=2, to wypadałoby przedyskutować, dla pełności prezentacji, własności modelu Hofstadtera i sieci trójkątnej przy C=1. Zebrane wyniki, aczkolwiek wnikliwe i obfite, wydają się nieco niespójne jeśli chodzi o: typ sieci, współczynnik wypełnienia i konkluzję co do obecności cech faz WC/FCI. W trakcie obrony prosiłbym o syntetyczne podsumowanie (być może tabelaryczne) jakie modele, przy jakich ν i C były badane i jakie fazy są (lub nie są) możliwe do zaobserwowania.

Mimo przedstawionej uwagi, praca opisana w rozdz. 5 jest niewątpliwie wartościowa. Dostarcza wszechstronnego spojrzenia na bogatą interakcję między fazami krystalicznymi a topologicznymi w układach z topologicznymi pasmami płaskimi. Badanie dokładnie analizuje stabilność różnych faz i wpływ zakresu oddziaływań, przyczyniając się do lepszego zrozumienia diagramu fazowego w tych oddziałujących układach.

W kolejnym rozdz. 6 autor przedstawia oryginalną, efektywną metodę identyfikacji zerowych stanów Majorany (MZM) wewnątrz przerwy nadprzewodzącej w strukturach niskowymiarowych o nietrywialnej topologii i z włączonym kanałem parowania. Zaproponowane podejście redukuje problem do rodziny metod Kryłowa (w tym restartowanej metody Arnoldiego), oferując nisko-kosztowy sposób analizy profili przestrzennych i spektrum stanów Majorany.

Powszechnie stosowane teoretyczne metody badania stanów Majorany opierają się na korespondencji między stanami objętościowymi a brzegowymi lub też wymagają użycia ścisłej diagonalizacji. Przedstawiona w pracy metoda wyróżnia się efektywnością obliczeniową, umożliwiając badanie znacznie większych układów, o dość dowolnym kształcie czy geometrii. W pracy omówiono motywację wprowadzenia tej metody oraz jej potencjalne zastosowania.

Wyprowadznie metody zostało wyczerpująco opisane w rodz. 6.1.1. Wychodząc z relacji komutacyjnych fermionów Majorany i ich właściwości transformacyjnych, autor identyfikuje odpowiednią transformację ortogonalną eliminującą efektywne fermiony Majorany w przekształconym hamiltonianie. Wyprowadzony warunek jest równoważny obecności MZM-ów.

Efektywność metody jest dobitnie zilustrowana na przykładzie trójwymiarowego modelu nano-drutu z uwzględnieniem oddziaływań typu Rashby (rozdz. 6.2.3 z rysunkami 6.9, 6.10 oraz 6.11). Diagram fazowy ukazuje obecność wielu MZMów, natomiast analiza ich przestrzennej struktury ujawnia systematycznie występowanie symetrycznych rozkładów oraz oscylacji przestrzennych wzdłuż nano-drutu.

Metoda jest następnie stosowana do badania topologicznych stanów w przerwie nadprzewodzącej magnetycznej nano-wyspy, przy uwzględnieniu jej ogólnego (nieregularnego) kształtu. Analizie poddano przestrzenny rozkład MZM-ów wzdłuż krawędzi, szczegółowo badając skalowanie energii tych stanów z rozmiarem układu. Chociaż nie obserwuje się stanów MZM w ściśle zerowej energii, to skalowanie wskazuje na obecność wielu stanów, których energia staje się zerowa w granicy termodynamicznej.

Przedstawiona w rozdz. 6 metoda oferuje efektywny sposób identyfikacji brzegowych stanów Majorany w modelach ciasnego wiązania z włączonym mechanizmem parowania elektronów. Ułatwia badania układów o dowolnych kształtach i rozmiarach, dostarczając wiedzy o przestrzennym rozkładzie i spektrum bliskich zera stanów Majorany. Wyniki przedstawione w rozdziale 6 są znaczące naukowo, ciekawie przedstawione i uzyskane przy pomocy oryginalnego, ale metodologicznie poprawnego podejścia.

Ocena części badawczej.

Doktorant uzyskał istotne naukowo wyniki i potrafił przedstawić je w merytorycznie poprawnym tekście naukowym niniejszej rozprawy. Poprawnie stosował i konsekwentnie rozwijał przyjętą metodologię. Opisane wyniki dokumentują postęp doktoranta w rozumieniu teoretycznym zaawansowanych zagadnień fizyki stanów topologicznych i świadczą o umiejętności prowadzenia oryginalnych badań naukowych w dziedzinie fizyki teoretycznej materii skondensowanej.

Konkluzja.

Stwierdzam, że przedstawiona do oceny praca przygotowana przez mgr. Michała Kupczyńskiego spełnia ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Uważam, że naukowa jakość uzyskana przez kandydata wyników spełnia zwyczajowe oczekiwania formułowane w postępowaniu doktorskim. Wnoszę o przekazanie postępowania do dalszych kroków, w tym do publicznej obrony rozprawy.

Leiden, 23.01.2023 r.