

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. inż. Andrzeja Więckowskiego
pt. „**Mody Majorany w jednowymiarowych układach
z oddziaływaniami wielociałowymi**”

Przedłożona praca doktorska przedstawia teoretyczny opis właściwości kwazicząstek typu Majorany, które realizują się w nanoskopowych łańcuchach atomów typu magnetycznego lub półprzewodnikowych nanodrutach umieszczonych w bezpośrednim kontakcie z litymi nadprzewodnikami. Głównym przedmiotem przeprowadzonej analizy było zbadanie wpływu oddziaływań wielociałowych na kwazicząstki zerowej energii, opracowanie skutecznej metody numerycznej do identyfikacji modów Majorany i zastosowanie tej procedury do zbadania dynamiki operacji splatania (ang. *braiding*) tych kwazicząstek. Są to aktualnie bardzo ważne zagadnienia badawcze.

Praca doktorska została przygotowana w Katedrze Fizyki Teoretycznej na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki na Politechnice Wrocławskiej. Promotorem rozprawy jest prof. dr hab. Marcin Mierzejewski, zaś funkcję promotora pomocniczego pełnił dr Bartłomiej Gardas z Politechniki Gliwickiej. Wybrane wyniki zostały opublikowane przez Doktoranta w następujących artykułach naukowych: *Phys. Rev. Lett.* **120**, 040504 (2018); *Phys. Rev. B* **100**, 144510 (2019); *Phys. Rev. B* **101**, 104504 (2020). Kolejna oryginalna praca (bliska problematyce rozprawy doktorskiej) ukazała się w preprintach arXiv:2006.10153 (2020). Poniżej przedstawię przegląd ważniejszych wyników Autora.

Pierwsza część rozprawy (rozdziały 1-3) ma charakter wprowadzający. Doktorant wyjaśnił istotę fermionów Majorany i odwołał się do scenariusza Kitaeva, który zainspirował poszukiwanie kwazicząstek o podobnych właściwościach w materii skondensowanej. Przedstawił zasadnicze cechy kwazicząstek typu Majorany (charakteryzujących się równoważnością cząstki z antycząstką) możliwych do uzyskania w jednowymiarowych łańcuchach wędrownych elektronów z trypletowym parowaniem międzywęzłowym. Liczba modów zerowej energii jest określona poprzez zasadę korespondencji (ang. *bulk-to-boundary correspondence*) i takie kwazicząstki występują na brzegach układu, co stanowi też istotę ich ochrony topologicznej. Poza tym kwazicząstki Majorony podlegają ułamkowej statystyce (formalnie nie są więc fermionami) i wykazują charakter nieabelowy, tzn. kolejność przesta-

wień cząstek ma wpływ na stan układu fizycznego. Doktorant opisał w jaki sposób zabawkowy scenariusz Kitaeva można zrealizować w rzeczywistych układach fizycznych. Realistyczne modele bazują na synergii nadprzewodzącego efektu bliskości i helikalnego uporządkowania magnetycznego. Doktorant przedstawił następnie przegląd doświadczalnych realizacji topologicznego nadprzewodnictwa i przedyskutował empiryczny sposób detekcji kwazicząstek Majorany na podstawie wzmocnienia przewodnictwa różniczkowego zerowego napięcia (ang. *zero-bias conductance*). Frakcyjalny charakter kwazicząstek Majorany przejawia się poprzez skwantowaną wartość tego przewodnictwa, wynoszącą $2e^2/h$ (czyli połowę idealnego przewodnictwa Andreeva $4e^2/h$). Poza bezpośrednim pomiarem przewodnictwa prądu tunelowania wymienił alternatywne metody identyfikacji kwazicząstek Majorany. Nieabelową naturę tych kwazicząstek oraz ich nielokalny charakter można stwierdzić w oparciu o dynamiczne korelacje prądowe. Do tego celu wielkością przydatną jest pomiar szumu śrutowego w korelacjach krzyżowych (ang. *cross-correlation shot noise*). Doktorant opisał następnie efektywny scenariusz mikroskopowy oraz poruszył ważną kwestię wpływu oddziaływań wielociałowych na obszar występowania fazy topologicznie nietrywialnego nadprzewodnictwa i stabilność kwazicząstek Majorany. W podejściu Kitaeva udało się znaleźć szczególny przypadek (symetryczny), dla którego uzyskano ściśle rozwiązanie. W ogólniejszej sytuacji niezbędne jest natomiast zastosowanie wyrafinowanych metod obliczeniowych, np. ściślej diagonalizacji dla układów skończonych lub podejścia grupy renormalizacyjnej. Doktorant nakreślił cel swoich badań ukierunkowanych na opracowanie oryginalnej metody numerycznej do identyfikacji kwazicząstek Majorany, określenia wpływu oddziaływań i analizy operacji przeplatania (tzn. zamiany miejscami) takich kwazicząstek.

W drugim rozdziale podana została definicja operatorów Majorany i związek takich operatorów ze standardowymi cząstkami typu fermionowego a także wprowadzono operator parzystości układu. Doktorant zdefiniował operatory zerowych modów Majorany, nakładając na operatory Majorany warunek komutowania z hamiltonianem układu (równoważny definicji całek ruchu). Użyteczność operatorów zerowych modów Majorany zilustrował na przykładzie hamiltonianu modelu Kitaeva. W przypadku fazy trywialnej nie istnieje żadna kombinacja operatorów Majorany, która komutuje z Hamiltonianem (tzn. brak jest całek ruchu). W odróżnieniu od takiej sytuacji, w fazie nietrywialnej topologicznie całkami ruchu są operatory kreacji/anihilacji Majorany z pierwszego/ostatniego węzła łańcucha. Z takich operatorów można skonstruować nielokalny fermionowy stopień swobody, który determinuje kolektywną naturę kwazicząstek Majorany (stanowiących szczególną mutację kwazicząstek Bogoliubowa).

W kolejnym wstępnym rozdziale (trzecim) przedstawiono zarys możliwego wykorzystania zerowych modów Majorany do obliczeń kwantowych i konstrukcji odpowiednich bramek kwantowych. Na bazie $2M$ zerowych modów Majorany przeanalizowano ewolucję układu w procesie adiabatycznej zamiany miejscami jednej pary takich kwazicząstek

Γ_i, Γ_j . Wybraną postać transformacji unitarnej (3.23) wyrażono za pomocą operatora parzystości i skonstruowano operator splatania (3.31). Zbiór takich operatorów tworzy generatory M-włóknowej grupy warkoczowej Artina, spełniających równania Yanga-Baxtera. Doktorant pokazał w jaki sposób można reprezentować grupę warkoczową, włókna i operacje splatania. Przedstawił następnie scenariusz utworzenia qubitu na bazie czterech zerowych modów Majorany i zilustrował sposób konstrukcji kwantowych bramek typu Z (rysunek 3.2), X (rysunek 3.3), Y (rysunek (3.4) oraz bramki Hadamarda (rysunek 3.5). Przedyskutowano też problematyczną realizację bramki fazowej $R(\frac{\pi}{4})$, która jest niezbędna do zagwarantowania uniwersalności obliczeń kwantowych.

Druga część rozprawy (rozdziały 4-6) opisuje metodologiczne aspekty przeprowadzonych badań. W szczególności, rozdział czwarty przedstawia technikę ścisłej diagonalizacji układów o skończonych rozmiarach. Doktorant opisał konstrukcję bazy układu i wyodrębnienia podprzestrzeni Hilberta w oparciu o kryterium parzystości. Uwzględnienie symetrii realizowanych w badanym układzie fizycznym umożliwia numeryczną diagonalizację macierzy o większych rozmiarach. Przykładową strukturę elementów macierzowych dla łańcucha Kitaeva z oddziaływaniem międzywęzłowym pokazano na rysunku 4.2. W rozdziale piątym opisano algorytm określania operatorów zerowych modów Majorany, które ściśle lub w przybliżeniu spełniają kryterium całek ruchu. Pomysł wywodzi się z wcześniejszych badań profesora Mierzejewskiego [Phys. Rev. Lett. **114**, 140601 (2015); Phys. Rev. B **92**, 195121 (2015)] dotyczących poszukiwania zachowawczych wielkości w układach całkowalnych. Konstrukcja ma postać linowej kombinacji operatorów Majorany $\Gamma = \sum_i \alpha_i \gamma_i$ z rzeczywistymi współczynnikami α_i , których wartość liczbowa wyznacza się numerycznie nakładając warunek minimalnego odstępstwa od ścisłego kryterium całek ruchu. Ze względu na specyfikę kwazicząstek Majorany (występujących jako mody brzegowe wyłącznie w układach o skończonych rozmiarach) przedyskutowano ważną kwestię skalowania rozmiarowego (ang. *finite-size scaling*) względem współrzędnych przestrzennych i czasowych. W tym kontekście Doktorant wyodrębnił charakterystyczną skalę τ_M odpowiedzialną za relaksację zaindukowaną przestrzennym przekryciem kwazicząstek Majorany oraz inną relaksację, spowodowaną oddziaływaniami wielociałowymi. Rozdział szósty opisuje metodologię wyznaczania ewolucji układu kwantowego względem czasu. W podejściu numerycznym przedział czasowy jest dzielony na sekwencję krótkich przedziałów δt i na poszczególnych etapach operator ewolucji jest wyznaczany poprzez rozwiązanie równania różniczkowego metodą Runge-Kutta czwartego rzędu. Doktorant korzystał również z procedury rozwinięcia w szereg wielomianów Czebyszewa. W przypadku układów realizujących zerowe mody Majorany (podlegające nieabelowej statystyce) można wyodrębnić geometryczny oraz dynamiczny czynnik fazowy w procesach cyklicznej ewolucji od stanu początkowego $|\psi(0)\rangle$ do końcowego $e^{i(\phi_{geo} + \phi_{dyn})} |\psi(0)\rangle$. Doktorant podał sposób wyznaczania poszczególnych czynników fazowych oraz przedyskutował znaczenie różnic tych faz dla cyklicznej ewolucji stanów o odmiennych parzystościach.

Zasadnicze wyniki obliczeń przeprowadzonych przez Doktoranta zostały opisane w części trzeciej, obejmującej rozdziały 7-9. Rozdział siódmy analizuje wpływ oddziaływań typu gęstość-gęstość na realizację tzw. *mocnych* zerowych modów Majorany. Ten aspekt zbadano na przykładzie łańcucha bezspiniowych fermionów wędrownych z parowaniem międzywęzłowym oraz oddziaływaniami między najbliższymi (V) i kolejnymi najbliższymi sąsiadami (W). Ścisłą diagonalizację hamiltonianu oraz konstrukcję zerowych modów Majorany (w optymalny sposób spełniających kryterium całek ruchu) przeprowadzono dla łańcuchów o długości od kilku do dwudziestu stałych sieciowych, przyjmując $W = V/2$. W układzie bez korelacji ($V = 0$) przestrzenny profil zerowych modów Majorany wyznaczony na podstawie obliczeń oryginalnej procedury (opisanej w rozdziale 5) wykazał znakomitą zgodność ze spektralną gęstością kwazicząstek zerowej energii modelu Kitaeva (rysunki 7.2a-b). Na podstawie takiej wiarygodności Doktorant zbadał ewolucję profilu zerowych modów Majorany pod wpływem stopniowego wzrostu potencjału oddziaływań. Wyniki pokazały wyraźną tendencję do lokalizacji kwazicząstek Majorany na brzegach łańcucha. Oddziaływania wpływały jednocześnie na kształt funkcji autokorelacyjnej $\lambda(\tau)$. Zamiast gwałtownego skoku realizowanego w układzie bez korelacji w pobliżu czasu życia $\tau = \tau_M$ (rysunek 7.1a) oddziaływania powodowały przesunięcie czasu życia niemal o rząd wielkości i rozmycie skoku (rysunki 7.1b, 7.1c). Obszar skali czasowej, gdzie wartość funkcji $\lambda(\tau)$ znacząco odbiega od jedności świadczy o niekompletnym spełnieniu warunku całki ruchu. Na podstawie wartości funkcji autokorelacyjnej Doktorant opracował diagramy występowania *silnych* zerowych modów Majorany względem potencjału chemicznego μ , potencjału parującego Δ i oddziaływania V . Zakres ten skonfrontował następnie z obszarem fazy topologicznej określonej w oparciu o degenerację stanu podstawowego, określając obszar tzw. *miękkich* zerowych modów Majorany. Przeprowadzono również szczegółową analizę skalowania rozmiarowego, wyznaczając szybkość relaksacji zaindukowanej oddziaływaniami oraz funkcji autokorelacyjnej $\lambda(\tau)$ w granicy termodynamicznej $L \rightarrow \infty$. Powyższe wyniki jednoznacznie pokazują użyteczność zaproponowanej metody do identyfikacji kwazicząstek Majorany w układach skorelowanych.

W rozdziale ósmym rozszerzono analizę zerowych modów Majorany na przypadek łańcucha Kitaeva z oddziaływaniem dalekozasięgowym. Uwzględniono oddziaływania fermionów typu gęstość-gęstość o potencjale V_r do r -tego sąsiedniego węzła. Większość obliczeń numerycznych przeprowadzono dla łańcucha Kitaeva złożonego z 10 węzłów, przyjmując $r = 4$. Na podstawie wartości funkcji autokorelacyjnej $\lambda(\tau)$ Doktorant zbadał wpływ składowych potencjału oddziaływania V_r na zakres występowania kwazicząstek Majorany w zależności od potencjału chemicznego (rysunki 8.1 i 8.3) oraz potencjału parowania Δ (rysunki 8.2 i 8.4). Wyniki pokazały, że obszar realizacji *silnych* zerowych modów Majorany ulega zawężeniu pod wpływem oddziaływań dalekozasięgowych. Podobną tendencję wykazano również na podstawie degeneracji stanu podstawowego (rysunek 8.5) oraz szczeliny energetycznej (rysunek 8.6). Dodatkowym potwierdzeniem destruktywnego

wpływu oddziaływań dalekozasięgowych było zaobserwowanie nieznacznego rozmycia przestrzennego profilu kwazicząstek zerowej energii (rysunek 8.7). Znacznie bardziej wyraźny efekt częściowej delokalizacji zerowych modów Majorany przejawiał się w stopniu przekrycia takich kwazicząstek pomiędzy sąsiednimi węzłami (co ładnie ilustruje rysunek 8.8).

Zarówno rozdział siódmy [oparty na publikacji Phys. Rev. Lett. **120**, 040504 (2018)] jak też rozdział ósmy [bazujący na artykule Phys. Rev. B **100**, 144510 (2019)] doskonale ilustrują bardzo obiecującą perspektywę wykorzystania zaproponowanej metody detekcji *silnych* zerowych modów Majorany w jednowymiarowych układach skorelowanych. Taki sam schemat postępowania zastosowano z sukcesem również do bardziej realistycznych układów fizycznych opisanych dwu- i trójwymiarowymi modelami Kitaeva oraz Rashby [arXiv:2006.10153 (2020)]. Materiał ten nie został włączony do rozprawy doktorskiej, stanowi jednak ważne osiągnięcie Doktoranta.

Rozdział dziewiąty opisuje konstrukcję geometryczną, która umożliwia realizację bramki fazowej na bazie kwazicząstek Majorany. W tym celu rozpatrzono układ złożony z dwóch trójzłącz i przeanalizowano jego dynamikę zaindukowaną kontrolowaną zmianą energii na węźle (tzn. lokalnego potencjału chemicznego), która przełącza poszczególne segmenty układu z/do topologicznej fazy. Na bazie dwóch par zerowych modów Majorany można w takiej konfiguracji zrealizować bramki Hadamarda oraz CNOT z zagwarantowaną ochroną topologiczną. Problemem jest natomiast implementacja bramki fazowej $R(\theta)$ niezbędnej w zestawie bramek do zagwarantowania uniwersalności obliczeń kwantowych. W zaproponowanym protokole dopuszczono do częściowego przekrywania się kwazicząstek Majorany (rysunek 9.2b), co jednocześnie prowadzi do zniesienia degeneracji $\delta E \neq 0$ i powoduje utratę *stricte* majoranowego charakteru modów brzegowych. W cyklicznej ewolucji układ nabiera zarówno fazy dynamicznej (z powodu niezerowej wartości δE) jak i geometrycznej, ale dzięki symetrii cząstka-dziura w przypadku nieparzystej liczby węzłów fazę dynamiczną można wyeliminować. Po zakończeniu procedury wyplatania kwazicząstki Majorany są ponownie rozseparowywane na bezpiecznie dużą odległość. Funkcjonowanie bramki oparte jest więc na fazie geometrycznej. Doktorant dokonał oszacowania błędu wyplatania w zależności od rozmiaru układu (rysunek 9.5b), potencjału oddziaływań wielociałowych i pozostałych parametrów modelu mikroskopowego.

Rozprawa doktorska jest napisana klarownym językiem i została zredagowana z wielką starannością. Autor wyodrębnił trzy części poświęcone motywacji badań, aspektom metodologicznym i najważniejszym wynikom przeprowadzonych obliczeń numerycznych. Poszczególne rozdziały zostały opatrzone komentarzami na marginesach, które ułatwiają czytelnikowi zrozumienie tekstu pracy i poszukiwanie ewentualnych odsyłaczy. Stronę edytorską oceniam bardzo wysoko. Zauważyłem jedynie nieliczne potknięcia, np. [str. 13] „szum strzałowy” → szum śrutowy, [str. 19] wzór (2.2) powinien mieć postać $\gamma_i^\dagger = \gamma_i$, [str. 34] „korekcja” → korekta, [str. 71] „Z Równania” → Z równania, [str. 89] „powodują” → powoduje. Są to jednak tylko drobne mankamenty stylistyczne.

Krótką informacją o przebiegu edukacji i osiągnięciach Doktoranta

Andrzej Więckowski jest absolwentem międzywydziałowych indywidualnych studiów matematyczno-przyrodniczych na kierunku *matematyka i fizyka techniczna* ukończonych na Uniwersytecie Śląskim w Katowicach. Pracę inżynierską pt. *Numeryczne metody analizy dynamiki nanodrutów kwantowych* przygotował pod kierunkiem profesora Marcina Mierzejewskiego i obronił z wyróżnieniem w 2016 roku. Pracę magisterską pt. *Dynamics of disordered quantum annealers* obronił z wyróżnieniem w 2018 roku. Promotorem rozprawy był również profesor Marcin Mierzejewski. Od 2018 roku do chwili obecnej jest uczestnikiem studiów trzeciego stopnia *nauk fizycznych* na Politechnice Wrocławskiej, podtrzymując dotychczasową owocną współpracę z profesorem Mierzejewskim. Doktorant uczestniczył w około dziesięciu międzynarodowych konferencjach i warsztatach naukowych. Dwukrotnie prezentował referaty na moje zaproszenie dla lubelskiego środowiska fizyków materii skondensowanej. Jego wykłady były znakomicie przedstawione, świadcząc o staranności i dogłębnym zrozumieniu omawianej problematyki badawczej. Doktorant brał udział w realizacji grantu badawczego OPUS nr. 2016/23/B/ST3/00647 kierowanego przez swojego Promotora. Oprócz zagadnień dotyczących topologicznych faz materii mgr inż. A. Więckowski zajmował się problematyką tzw. kwantowych wygrzewaczy (ang. *quantum annealers*). Artykuł na ten temat ukazał się w *Phys. Rev. A*, kolejne dwie publikacje zostały przekazane do recenzji.

Podsumowanie

Przedłożona rozprawa dostarcza opisu oryginalnej procedury, który umożliwia identyfikację *mocnych* zerowych modów Majorany w różnych układach fizycznych. Doktorant zilustrował przydatność takiej procedury na przykładzie skorelowanych fermionów w nanołańcuchu Kitaeva. Zaproponował też konstrukcję bramki fazowej $R(\theta)$ zbudowanej na dwóch parach zerowych modów Majorany, gdzie rolę dynamicznego przesunięcia można skompensować kontrolowalnym doбором parametrów modelu. Metoda opracowana przez Doktoranta może być wartościowym narzędziem do badania topologicznych faz materii niskowymiarowych układów w obecności oddziaływań, nieporządku i innych realnych czynników fizycznych. Na tej podstawie przekazuję wniosek do Rady Wydziału Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej o dopuszczenie magistra inżyniera Andrzeja Więckowskiego do publicznej obrony Jego pracy doktorskiej. W uznaniu dla umiejętności posługiwania się wyrafinowanymi metodami w analizie skorelowanych układów topologicznych oraz niekwstionownie wysokiej jakości uzyskanych wyników opublikowanych w prestiżowych czasopismach naukowych wnioskuję jednocześnie o wyróżnienie niniejszej pracy doktorskiej.

Jacek Domański