dr hab. Wojciech Brzezicki
Zakład Kwantowej Teorii Wielu Ciał
Wydział Fizyki, Atronomii i Informatyki Stosowanej
Uniwersystet Jagielloński w Krakowie

RECENZJA PRACY DOKTORSKIEJ

Rozprawa doktorska pana magistra Michała Kupczyńskiego zatytułowana „Many body effects in topological materials and structures" skupia się na dwóch zagadnieniach. Pierwsze to konkurencja pomiędzy stanem ułamkowego izolatora Cherna a kryształem Wignera w modelach sieci krystalicznych. Drugie to poszukiwanie stanów Majorany w modelach nadprzewodników topologicznych.

Rozprawa składa się z sześciu głównych rozdziałów, podsumowania, listy publikacji autora i bibliografii. Podano także listę rysunków oraz skrótów. Sama rozprawa napisana jest w formie kanonicznej, nie ma zatem dołączonych publikacji, jest za to rozbudowany opis otrzymanych wyników. Rozdziały podzielone są na sekcji i podsekcje, poza rozdziałem wstępnym, który jest napisany jednym ciągiem. Oryginalne wyniki autora omówione są dopiero w rozdziałach piątym i szóstym, natomiast wszystko co jest wcześniej stanowi bardzo rozbudowany wstęp. Od strony graficznej praca sprawia wrażenie bardzo starannej.

Rozdział pierwszy to wstęp skupiający się na związku pomiędzy topologią a fizyką kwantową. Mamy więc tutaj nieśmiertelny obrazek pączka z dziurką i kubka, ilustrujący ideę topologii oraz dość rozległy rys historyczny zaczynający się od Edwina Halla i Jego efektu. Pewną wadą części matematycznej jest to, że nigdzie nie wyjaśniono czym jest ciągła transformacja, do której odwołuje się rysunek 1.1, więc należy się tego domyślać. Część historyczno-fizyczna jest napisana dość ciekawie i odpowiednio do tematyki pracy. Zastrzeżenia można tu mieć w kilku miejscach do stylu i gramatyki, np. „On the other side, the longitude of resistivity ...", „What is also very important, it also make it clear ..." lub „... topological states have the family of topological matter". Problematyka nadprzewodnictwa jest wprowadzona całkiem zręcznie natomiast połączenie nadprzewodnictwa z topologią odbywa się poprzez dwa akapity na temat modelu XY, które nie są zbyt jasne. Wstęp historyczny kończy się na omówieniu stanów Majorany, przy czym zupełnie pominięto tutaj fakt, że stanów tych nikomu nie udało się jak dotąd zaobserwować. Co więcej wiele prac dotyczących rzekomego odkrycia stanów Majorany zostało wycofanych. W ostatnim akapicie wstępu omówiona jest pokrótce zawartość pozostałych rozdziałów pracy.

Rozdział drugi jest najdłuższym, najbardziej technicznym i najbardziej wymagającym rozdziałem tej pracy. Mamy tu część czysto matematyczną, dotyczącą topologii algebraicznej, cześć dotyczącą faz geometrycznych w mechanice kwantowej oraz bardziej szczegółowe części dotyczące całkowitego i ułamkowego kwantowego efektu Halla, całkowitych i ułamkowych izolatorów topologicznych oraz modelu Kitaeva, który realizuje stany Majorany. Rozdział ten cechuje się przesadą. Zagadnień, które autor stara się omówić jest zbyt wiele i są one zbyt różnorodne, żeby rozdział ten był spójny i zrozumiały przy rozsądnym nakładzie sił czytelnika. Część matematyczna, na przykład, zaczyna się od najbardziej abstrakcyjnej definicji topologii, bazującej na zbiorach otwartych i na przestrzeni raptem jednej strony przeskakuje do charakterystyki Eulera i rozmaitości różniczkowalnych. Dalej czeka nas dziesięć stron przyspieszonego kursu topologii algebraicznej zanim dojdziemy do opisu klas Cherna, czyli tak naprawdę pierwszego pojęcia, które będzie nam potrzebne dalej. Kursu tego raczej nie jest w stanie zrozumieć ktoś, kto nie miał wcześniej styczności z tym działem matematyki.

Cześć dotycząca faz geometrycznej w mechanice kwantowej jest bardziej praktyczna. Mamy tu wprowadzone pojęcia koneksji i krzywizny Berry'ego w przypadkach z i bez degeneracji. Jest to zrobione dość dobrze, choć w przypadku nieprzemiennym można się doszukać pewnych nieścisłości, np. równaniach 2.109 i 2.113 mamy po jednej stronie indeksy macierzowe, których nie powinno być, równanie 2.114 i to której jest bezpośrednio po nim wydają się sprzeczne, a zapis wielokrotnej całki w równaniu 2.115 jest mało przejrzysty. Dalej mamy opis klasycznego efektu Halla, następnie wyprowadzenie poziomów Landau'a i opis kwantowego efektu Halla. Jest to napisane dość sprawnie, choć dyskusja dotycząca czynnika żyromagnetycznego jest mało jasna, a wyjaśnienie stopni przewodnictwa jest chaotyczne i niekompletne, bo nie dowiemy się co decyduje o długości poszczególnych schodków. Powiązanie kwantowego efektu Halla z topologią nie jest wytłumaczone w sposób jasny. W następnej części tekstu omawiane jest równanie Diraca w wymiarach przestrzeni od 1 do 3. Nieco razi tutaj błąd w pisowni nazwiska tego wielkiego uczonego oraz to, że warunki, które muszą spełniać macierze Diraca podane są bez żadnego uzasadnienia. Wyprowadzenie stanów brzegowych z tego równania jest pouczające, choć nie jest w sposób jasny uzasadnione czemu funkcja falowa pokazana na rysunku 2.11 musi znikać dla x=0. Nie jest też jasna dyskusja w przypadku dwuwymiarowym, np. dlaczego wektory w równaniach 2.182 i 2.183 mają po 4 składowe skoro w równaniu Diraca mamy macierze 2x2. Na wyrost jest też stwierdzenie, że w tej sekcji udowodniono, że nietrywialnie topologicznie układ w d wymiarach ma zawsze stan brzegowy o zerowej energii, ponieważ nie ma tu rozważonych wszystkich klas symetrii. Tę część rozdziału kończy sekcja dotycząca izolatorów Cherna. Mamu tu zdefiniowane i krótko omówione modele Hofstadtera oraz Haldane'a, przy czym więcej na ten temat znajdziemy w rozdziale czwartym.

Część rozdziału drugiego dotycząca efektów ułamkowych składa się z sekcji dotyczących: ułamkowego efektu Halla, ułamkowego izolatora Cherna i kryształu Wignera oraz ułamkowych statystyk wymiany. Ułamkowy efekt Halla opisany jest dość sprawnie, choć bardzo skrótowo i nie wszystko można zrozumieć. Z przedstawionego tu opisu teorii złożonych fermionów wynika też ułamkowy efekt Halla jest w pełni zrozumiany i nie ma tu nic więcej do zrobienia. Nie jest to chyba do końca prawda. Pozostałe zagadnienia są tu omówione w sposób, który nie budzi zastrzeżeń.

Ostatnie zagadnienie omawiane w rozdziale drugim dotyczącą stanów Majorany. Są one wprowadzone opierając się na równaniu Diraca, ale przeskok od całkowicie rzeczywistych macierzy Diraca w równaniu 2.215 do operatorów Majorany w równaniach 2.217-8 nie jest w żaden sposób wyjaśniony. Z kolei model Kitaeva zdefiniowany dalej z niejasnych powodów jest nazwany Hamiltonianem wielociałowym, choć jest formą kwadratową operatorów fermionowych. Osobną kwestią jest czy jako taki w ogóle pasuje do pracy na temat efektów wielociałowych. Niemniej dyskusja tego modelu i jego stanów brzegowych będących stanami Majorany jest poprowadzona sensownie. Ewidentnie brak tu tylko określenia klasy symetrii modelu i zdefiniowania niezmiennika topologicznego. Nie jest też prawdziwe stwierdzenie, że symetria parzystości chroni przerwę w spektrum i nie są prawdziwe twierdzenia, że stany Majorany udało się otrzymać doświadczalnie. Ostatnia cześć rozdziału, dotycząca bramek logicznych opartych o stany Majorany, jest już z kolei prawie całkowicie niezrozumiała, ale informacje tu podane i tak nie będą w żaden sposób przydatne w późniejszych rozdziałach.

Rozdział trzeci zawiera opisy metod numerycznych i analitycznych używanych przez autora. W większości są one sprawnie napisane i wystarczająco jasne. Mamy więc tu opis teorii fal Blocha oraz sposób na liczenie faz geometrycznych i liczby Cherna dla tychże fal. Mamy też dość krótką ale ciekawą sekcję dotyczącą splątania w kontekście izolatorów Cherna. Lekką przesadą wydaje się z kolei przywoływanie kanonicznych reguł komutacji pomiędzy fermionami w sekcji na temat ścisłej diagonalizacji. Tutaj także wątpliwości budzi definicja pędów wielodziałowych, a konkretnie czynników $2\pi/N$, a także dość tajemniczo wyglądająca definicja K ze wzoru 3.47. Niektóre sformułowania nie są tu też najzręczniejsze, np. „However, the latter will show how they are calculated in the models considered in this dissertation.", „It can be proven that the only elements $V_{k1k2k3k4}$ conserving momentum has a non-zero value by looking into the sum ..." lub „As was shown only the states which are differ at least two operators ...". Ogólnie jednak tekst jest zrozumiały.

Dalej mamy sekcję dotyczącą identyfikacji kryształów Wignera poprzez funkcję korelacji par. Koncepcja ta jest dość jasna i prosta, natomiast opis transformat Fouriera i siły krystalizacji wydaje się niepotrzebnie zawiły. Kolejna sekcja dotyczy już stanów ułamkowych izolatora Cherna. Koncepcja reguł zliczania przedstawiona jest tu w dość niejasny sposób i trzeba się domyślać co ona oznacza. Użyty jest tu też to kilka razy nieprawidłowy przymiotnik „qusi-degenerated". Z kolei w części dotyczącej przepływu spektralnego wzór 3.76 wbrew temu co jest napisane nie ma wiele wspólnego z nieabelową krzywizną Berry'ego, tylko jest prostą sumą po liczbach Cherna q różnych stanów. Nie jest też jasna końcowa uwaga mówiąca o tym, że wystarczy zmieniać tylko jeden kąt i nie potrzeba wektorów własnych, żeby rozpoznać stan ułamkowego izolatora Cherna, ponieważ wcześniej podane wzory 3.76 i 3.76 mówią coś innego. Następne części tekstu dotyczą splątania cząstek oraz przekrywania ze stanem ułamkowym Halla. Są one dość trudne do zrozumienia i nie wszędzie jasno napisane, ale ich znaczenie można zrozumieć później, kiedy te metody zostają użyte do konkretnych modeli. Rozdział dotyczący metod kończy krótki, ale dość klarowny opis diagonalizacji hamiltonianów nadprzewodników.

Rozdział trzeci składa się z definicji i schematycznych rysunków różnych modeli ciasnego wiązania, które mają niezerowe liczby Cherna. Są to modele bezspinowe z zespolonymi całkami przeskoku pomiędzy bliższymi i dalszymi sąsiadami podobne do modelu Haldane'a. Zdefiniowano je na różnego typu sieciach: heksagonalnych, trójkątnych, kagome, itp.. Pokazane są topologiczne diagramy fazowe, krzywizny Berry'ego oraz kształty pasm, a nawet entropie splątania. Po przedyskutowaniu własności topologicznych modeli nieoddziałujących dodane zostaje oddziaływanie typu gęstość-gęstość w celu zbadania stanów ułamkowych izolatora Cherna i kryształu Wignera. Brakuje to nieco schematycznych rysunków rzeczywistych układów, które były liczone: nie wiadomo na przykład jak wyglądały warunki brzegowe dla układów o różnych rozmiarach dla różnych typów sieci. Nie jest dobrze wyjaśnione dlaczego dla stanu ułamkowego izolatora Cherna istotna jest możliwie plaska krzywizna Berry'ego. Parę razy jest też użyty nieprawidłowy zwrot „depend from" i kompletnie niejasne są zdania pod wzorem 4.7: „This interaction type requires ..." oraz „However, in this study, the screening ...", ponieważ nie jest wyjaśnione czym są i skąd się biorą „periodic images of a given site". Ogólnie jednak ciekawe i pozytywne jest to, że dla tak niewielkich układów, jakie są tu badane rzeczywiście możliwe jest otrzymanie tak nietrywialnych stanów jak ułamkowy izolator Cherna i kryształ Wignera. Pewnym brakiem jest tu być może to, że badanie modele są zawsze w fazie topologicznie nietrywialnej, więc można się zastanawiać, czy np. dla kryształu Wignera istotne jest to, że mamy nietrywialną liczbę Cherna.

Rozdział piąty oparty jest na publikacjach autora dotyczących konkurencji pomiędzy stanami krzyształu Wignera a stanem ułamkowym izolatora Cherna dla różnych gęstości elektronowych i wartości liczb Cherna (C=1 lub C=2). Głownym wynikiem jest tu pokazanie przy pomocy narzędzi numerycznych, że układ o niskiej gęstości i niskiej liczbie Cherna faworyzuje stan kryształu Wignera, a o wyższej gęstości lub wyższej liczbie Cherna stan ułamkowego izolatora Cherna. Dodatkowym wynikiem jest pokazaniem dwóch możliwych typów krystalizacji Wignera dla cienkich cylindrów, przy czym typ zależy od parzystości mianownika we współczynniku wypełnienia, czyli od gęstości elektronowej.

Przejście od ułamkowego izolatora Cherna do kryształu Wignera badano w funkcji paramеru zasięgu oddziaływać α. Całkiem udanym sposobem prezentacji wyników numerycznych jest pokazanie spektr energetycznych badanych układów w funkcji α i pokolorowanie ich według wartości dodatkowych parametrów takich jak siła krystalizacji, przekrywanie ze stanem ułamkowym Halla, itp.. Wykresy takie mamy np. na rysunku 5.2 i bardzo sugestywnie obrazują one przejście między tymi dwoma stanami. Ciekawe są tu spektra 5.3 b i d, które wydają się sugerować dwa przejścia, ponieważ pasma mają osobliwości dla dwóch różnych wartości parametru α. Nie jest to natomiast omówione w tekście. Sam tekst ma też swoje słabości, np. akapit pod rysunkiem 5.4 wydaje się mówić na temat tego właśnie rysunku, a nie rysunku 5.3. Z kolei drugie zdanie podsekcji 5.2.2 odwołują się do informacji z podsekcji 2.6.2, której jednak tam nie ma, a samo zdanie jest niegramatyczne. Nie jest też jasne o jakim maksimum siły krystalizacji mowa dla α=0.91, bo na rysunku 5.5 nie widać, żeby to była wartość szczególna. Dość tajemnicze wydaje się też to, że dla dużych α w układzie 8x5 występują problemy ze zbieżnością diagonalizacji. Nie do końca też wiadomo jaki jest cel umieszczania na rysunku 5.4 pęku przerywanych pionowych linii, które nic szczególnego nie pokazują dla wykreślonych tam krzywych.

Część dotycząca liczby Cherna C=2 jest interesująca, ponieważ obrazuje rolę topologii w konkurencji pomiędzy dwoma badanymi fazami. Niemniej, uwaga dotycząca „colour-entangling" na początku sekcji 5.3 jest kompletnie niejasna. Z kolei w drugim zdaniu pod rysunkiem 5.6, mamy prawdopodobnie złe odnośniki do wykresów, bo z kontekstu wynika, że omawiane są rysunki 5.6 b i d. Następnie, zdanie pod rysunkiem 5.7 jest dziwnie niegramatyczne i wydaje się być zlepienie dwóch innych zdań. W podsekcji 5.3.2 kompletnie niejasne są rozważania z drugiej połowy pierwszego akapitu dotyczące „momentum subspaces", co wynika z tego, że sekcja na temat reguł zliczania w rozdziale metod jest niejasna. W dalszej części tej podsekcji mamy rozważania na temat wielu różnych typów sieci i dyskusja staje się dość chaotyczna. Ciekawym wynikiem, który nie jest tu omówiony jest drugie przejście fazowe, widoczne na rysunki 5.9 h. Interesującym zagadnieniem byłby też typ przejścia fazowego pomiędzy dwoma rozważanymi stanami w granicy termodynamicznej.

Rozdział szósty jest ostatnim rozdziałem zasadniczej części rozprawy, a zarazem drugim zawierającym oryginalne wyniki autora. Jego przedmiotem są rozważania na temat obecności stanów Majorany w modelach nadprzewodnika typu nanodrut Rashby. Mowa tu o modelach jednocząstkowych ze sprzężeniem spin-orbita i polem magnetycznem Zeemana. Są to najbardziej typowe modele, w których bada się stany Majorany. Autor wykorzystał tu metodę polegającą na szukaniu stanu zerowego w spektrum, natomiast nie są tu nigdy liczone ani omawiane niezmienniki topologiczne. Jest to słaby punkt tego rozdziału, ponieważ w modelach wyżej wymiarowych nie znamy pochodzenia stanów brzegowych, które widać np. na rysunku 6.5. Nie jest też jasne skąd bierze się większa ilość stanów Majorany, np. na rysunkach 6.6 i 6.9, ponieważ typowy dla takich układów niezmiennik Z_2, przewiduje tylko jedną parę takich stanów. Nie wiem też dlaczego w układzie dwuwymiarowym stany Majorany miałyby być oddzielone przerwą od reszty spektrum. Brakuje to wykresu pasm dla układu półotwartego. Ogólna jakość tego rozdziału jest jednak dobra, a przyjęta metoda obliczeń okazuje się skuteczna.

Rozprawę doktorską kończy podsumowanie wszystkich otrzymanych wyników. Jest ono napisane sprawnie i zawiera listę wszystkich prac autora. Trochę niepotrzebne wydaje się opisywanie i cytowanie dwóch prac, które nie są częścią tej rozprawy. Nie ma też myśli przewodniej która by łączyła dwie odnogi tematyczne tej pracy, czyli stanów Majorany ze stanami ułamkowymi Cherna i kryształami Wignera.

Kończąc tę recenzję chciałbym podkreślić, że praca doktorska pana Kupczyńskiego jest ambitna i stoi na wysokim poziomie. Wyniki otrzymane przez Niego są interesujące i zostały opublikowane w bardzo dobrych czasopismach fizycznych. Nie budzi moich wątpliwości to, że wkład autora tej rozprawy w powstanie tych artykułów był bardzo istotny. Dorobek naukowy pana Kupczyńskiego jest więc wystarczający i spełnia z nadmiarem przyjęte zwyczajowo wymagania dla kandydatów do stopnia doktora nauk fizycznych. Z tego względu wnoszę o przyjęcie rozprawy i dopuszczenie pana magistra Michała Kupczyńskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

W. Brzezicki

Kraków 10.11.2023