UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

INSTYTUT FIZYKI IM. MARIANA SMOLUCHOWSKIEGO
*Zakład Teorii Materii Materii Skondensowanej i Nanofizyki*

**dr hab. Adam Rycerz**

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

Kraków, 5 lutego 2019

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Błażeja Jaworowskiego pt. "Electron correlations in topological flat bands"**

Recenzowana praca doktorska została wykonana w Katedrze Fizyki Teoretycznej Wydziału Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej, promotorami byli prof. dr hab. inż. Arkadiusz Wójs (PWr) i prof. dr Paweł Hawrylak (Uniwersytet w Ottawie), zaś promotorem pomocniczym dr inż. Paweł Potasz (PWr).

Przedmiotem badań teoretycznych opisanych w rozprawie były własności fizyczne silnie skorelowanych układów elektronów w wybranych przykładach tzw. *materiałów topologicznych*, których dodatkową cechą wspólną była dominacja energii potencjalnej nad kinetyczną (co umownie nazwano przypadkiem *płaskich pasm*). Warto nadmienić, że podobna sytuacja występuje m.in. w dwuwarstwowym grafenie, w którym warstwy skręcone są względem siebie o tzw. *kąt magiczny*. We wspomnianym materiale, w marcu ubiegłego roku zaobserwowano fazę nadprzewodzącą, która po raz pierwszy w ponadstuletniej historii nadprzewodnictwa pojawiła się w układzie zbudowanym wyłącznie z atomów węgla (wcześniejsze doniesienia o nadprzewodzących nanorurkach węglowych nie potwierdziły się).

Widzimy zatem, że zagadnienia dyskutowane w recenzowanej pracy pozostają w łączności z najgorętszymi tematami współczesnej fizyki materii skondensowanej.

Rozprawa podejmuje trzy szczegółowe problemy badawcze, w których rozwiązanie zaangażowany był doktorant: zagadnienie stabilności i własności fazy Haldane'a w łańcuchu półprzewodnikowych kropek kwantowych, istnienie tzw. fazy *ułamkowego izolatora Cherna* (ang. *fractional Chern insulator*) w wybranych dwuwymiarowych modelach sieciowych, jak również rola oddziaływań dalekiego zasięgu i współzawodnictwo faz izolatora Cherna i kryształu Wignera. Przedstawione wyniki zostały wcześniej opisane w czterech artykułach naukowych, opublikowanych

w czasopismach: *Scientific Reports* (2017), *Physical Review B* (2015), *Physics Letters A* (2018), oraz *New Journal of Physics* (2018). We wszystkich przypadkach doktorant był pierwszym autorem artykułu.

Pracę rozpoczyna obszerne wprowadzenie (46 stron), w którym doktorant omawia — w szerokim kontekście — liczne fazy topologiczne zidentyfikowane w układach zaliczanych do fizyki materii skondensowanej. Podkreślono w szczególności, że znane fazy topologiczne dzielą się na dwie rozłączne klasy: układy z tzw. *samoistnym porządkiem topologicznym* (ang. *Intrinsic Topological Orders — ITO*), oraz fazy topologiczne *chronione przez zachowanie symetrii* (ang. *Symmetry—Protected Topological Phases — SPT*) . Do pierwszej z tych klas należą rozważane w pracy ułamkowe izolatory Cherna, zaś do drugiej — fazy Haldane'a.

W rozdziale drugim (ang. *Methodology* — 58 stron) omówione zostały kluczowe metody numeryczne używane w badaniach teoretycznych doktoranta. Są to (w kolejności przyjętej przez autora rozprawy): metoda tzw. *ścisłej diagonalizacji* (ang. *Exact Diagonalization — ED*), omówiona osobno dla układów spinowych i fermionowych, a następnie metoda numeryczna tzw. *grupy renormalizacji macierzy gęstości* (ang. *Density Matrix Renormalization Group — DMRG*), w przypadku której sporo miejsca poświęcono reprezentacji stanu podstawowego (przedstawianego formalnie jako iloczyn operatorów kwantowomechanicznych, co często określa się mówiąc, że stan "należy do klasy stanów będących iloczynami macierzowymi", ang. *Matrix Product States — MPS*). Dalej, autor omawia związki stanów otrzymywanych w metodzie DMRG z formalizmem tzw. *sieci tensorowych*, analizując w szczegółach wybrane przykłady. Rozdział zamyka opis kryteriów identyfikacji faz izolatora Cherna i kryształu Wignera stosowanych w dalszych częściach rozprawy.

Rozdziały trzeci (ang. *The Haldane phase in synthetic quantum dot chains*) i czwarty (*Many-particle states in 2D topological flat bands*), o łącznej objętości 62 stron, zawierają skrótowy opis wyników przedstawionych w czterech artykułach źródłowych (pozycje [64] oraz [251—253] wg załączonej bibliografii), których doktorant jest pierwszym autorem. W pierwszym z tych rozdziałów przedstawiony jest, wraz z wyprowadzeniem, efektywny Hamiltonian opisujący wzbudzenia niskoenergetyczne w łańchuchu półprzewodnikowych kropek kwantowych (model *Hubbarda-Kanamoriego*), a następnie omówiono szczegółowo rozwiązania mające postać zlokalizowanych spinów 1/2 na krańcach układu (tzw. fazy Haldane'a). Zwrócono także uwagę na perspektywy wykorzystania tych rozwiązań do realizacji kubitów spinowych. Rozdział czwarty poświęcony jest analizie diagramów wybranych modeli jedno- i dwuwymiarowych, w których pasma energetyczne posiadają tzw. ładunki topologiczne (tj. niezerowe *liczby Cherna*), a jednocześnie obecne są dalekozasięgowe oddziaływania elektronów.

Rozprawę zamykają: systetyczne (dwustronicowe) podsumowanie przedstawionych wyników oraz obszerny spis literatury cytowanej (285 pozycji).

**Ocena rozprawy**

Przystępując do oceny przedstawionej rozprawy należy zaznaczyć, że została ona przygotowana z dużą starannością, a udokumentowany publikacjami dorobek naukowy jej autora z nawiązką spełnia formalne wymagania stawiane osobom ubiegającym się o nadanie stopnia naukowego doktora.

Poniżej zebrałem nieliczne uwagi krytyczne i zagadnienia wymagające dokładniejszego wyjaśnienia podczas publicznej obrony.

Nieco problematyczny wydaje się układ pracy i wybór materiału, który autor postanowił zamieścić w swojej rozprawie. Chociaż kompozycja zasadniczo wydaje się poprawna i nie odbiega w istotny sposób od zwyczajów przyjętych w doktoratach z fizyki materii skondensowanej, nie sposób oprzeć się wrażeniu, że niektóre (mniej istotne dla oceniającego) fragmenty pracy najwyraźniej rozrosły się nadmiernie podczas pisania, co nie pozostało bez wpływu na jakość prezentacji oryginalnych wyników autora w końcowych rozdziałach pracy (do tej kwestii nawiązuję niżej). Widzimy na przykład, że rozdziały *Introduction* i *Methodology* liczą łącznie ponad 100 stron, zaś rozdziały 3. i 4. — 62 strony, a zatem wzajemne proporcje części wprowadzających i prezentujących wyniki są mocno zaburzone. Jestem przekonany, że fragmenty zawierające obszerne opisy różnych wersji algorytmu DMRG, oraz związku tego algorytmu z formalizmem sieci tensorowych, nie są — przynajmniej w tak rozbudowanej formie — niezbędne dla zrozumienia wyników fizycznych (autor zaznacza dalej, że używał pakietu oprogramowania *iTensor* autorstwa Stephena R. White'a i współpracowników), a już na pewno można by je przedstawić w formie dodatków na końcu pracy. Ciekawsze mogłoby być przedstawienie pewnych szczegółów technicznych (*potocznie:* "benchmarków") dotyczących np. czasów obliczeń (lub liczby operacji zmiennopozycyjnych) w kluczowych przypadkach, oraz aspektów programowania rozproszonego (np. które ze stosowanych metod obliczeniowych posiadają efektywne implementacje współbieżne, a które nie?).

Czytając rozprawę niestety trudno zorientować się, na czym dokładnie polegał wkład pracy doktoranta w powstanie oryginalnych wyników prezentowanych w pracach [64] oraz [251—253] (numeracja wg bibliografii); co prawda praca w *Scientific Reports* zawiera pewne informacje na ten temat, zaś pierwsza pozycja doktoranta na liście autorów sugeruje, że wkład pracy był wiodący — jednak brak

dalszych szczegółów utrudnia ocenę rozprawy. Jestem jednak przekonany, że ta kwestia zostanie wyjaśniona podczas publicznej obrony.

Poniższa lista zawiera dalsze, bardziej szczegółowe pytania, na które oczekuję odpowiedzi podczas obrony:

1. Czy stany kwantowe otrzymywane w metodzie DMRG (wspomniane "stany klasy MPS", patrz §2.2.3: *Matrix product states*) są wystarczająco elastyczne, aby opisać układ w punkcie przejścia fazowego?

2. Eksperymentalne realizacje kropek kwantowych, podobnych do rozważanych w rozdziale 3. rozprawy, są ograniczone do układu podwójnej kropki. W jaki sposób niedoskonałości procesu fabrykacji kropek (kropki nie będą identyczne!) mogą wpływać na stabilność fazy Haldane'a w długim łańcuchu?

3. Wydaje się, że wyniki numeryczne przedstawione na Rys. 4.13(a) (dot. modelu Su-Scrieffera-Heggera) można łatwo uzupełnić o numeryczną ekstrapolację przerwy dla $1/N_{part}$ —> 0. Taki zabieg, wraz z wyliczeniem błędu ekstrapolacji (np. metodą Richardsona) powinien pozwolić na systematyczną weryfikację hipotez na temat natury stanu układu nieskończonego.

4. Czy podręcznikowe kryterium lokalizacji Motta-Hubbarda można by zastosować do układu rozważanego w §4.3.2 (*Liquid to crystal transition*)?

5. Wydaje się, że wyniki przedstawione w §4.3 (*Wigner crystallization in topological flat bands*) warto byłoby porównać a analogicznymi wynikami dla tzw. dwuwymiarowego gazu elektronowego (ang. *two-dimensional electron gas — 2DEG*). Również warto byłoby sprawdzić, czy stosowana metoda odtwarza wyniki dla elektronów uwięzionych w sieci typu plaster miodu (monowarstwowy grafen), w przypadku których, dla wypełnień zbliżonych do połówkowego, stosunek energii kinetycznej do potencjalnej jest stały i krystalizacja Wignera nie zachodzi.

W końcowej części recencji zebrałem pozostałe uwagi, w przeważającej mierze o charakterze technicznym / edytorskim:

- W początkowej części *Introduction*: brak klarownego rozróżnienia faz *termodynamicznie stabilnych* (tj. takich, w przypadku których mamy globalne minimum potencjału termodynamicznego odpowiedniego do sytuacji) oraz *metastabilnych* (których przykładem mogą być heterostruktury) sprawia wrażenie pewnego pomieszania pojęć. Rzecz jasna, klasyfikacja Landaua przejść fazowych dotyczy wyłącznie tych pierwszych. Podobnie, stwierdzenie "they do not exhibit any

broken symmetry" (patrz §1.1.1: *Historical overview*) jest nieprecyzyjne: w rozważanych przykładach nie mamy do czynienia ze *spontanicznym złamaniem symetrii*, jednak symetria może (i często jest!) łamana przez czynniki zewnętrzne, np. zewnętrzne pole magnetyczne łamie symetrie rotacyjną i odwrócenia czasu, zaś oddziaływanie z podłożem heterostruktury łamie symetrię translacyjną.

- Również w *Introduction*, §1.1.3 (*Adiabatic continuity […]*) pojęcie przerwy (*gap*) pojawia się bez objaśnienia o jaką dokładnie przerwę chodzi — w sekcji poświęconej dyskusji stanu podstawowego odwołanie do widma wzbudzeń powinno zostać poprzedzone jednoznacznymi definicjami.

- §1.3.1 (*Integer quantum Hall effect*): napisano błędnie, że $\sigma_{xy}$ jest proporcjonalne do pola B, w istocie jest ono odwrotnie proporcjonalne (proporcjonalne jest $V_H$).

- §1.3.8 (*Edge states)*: przyczyna zachowania $p_y$ ze wzrostem energii pozostaje niejasna; rozumowanie dotyczące własności stanów krawędziowych jest zatem logicznie niespójne.

- §2.1.2 (*Exact diagonalization for fermions*): wywód w kilku miejscach jest niejasny; przydałby się tutaj przepis działania operatorów kreacji/anihilacji na stany bazowe (który pojawia się nieco później: §2.2.2, punkt *The Jordan-Wigner mapping*) oraz garść informacji o algorytmie generowania kombinacji (lub stosowne odsyłacze do literatury informatycznej).

- §3.1 (*The model*): wyrażenie na wielkość zrenormalizowane ("z gwiazdkami") nie zachowują odpowiednich jednostek. Wzór na efektywny promień Bohra powinien mieć postać: $a_B^* = (\varepsilon / \varepsilon_0)\, a_B\, (m_0 / m^*)$, podobnie wzór na Ry*.

- *Tamże*: analogia z dwuwymiarowym oscylatorem harmonicznym wydaje się dość odległa (inna zależność radialna potencjału), wspólne dla tych układów jest oczywiście zachowanie składowej *z* krętu orbitalnego.

- §3.2 (*The Hubbard—Kanamori model*): rachunki szczegółowe w tym rozdziale lepiej byłoby przenieść do dodatku na końcu pracy; końcowy Hamiltonian (3.14) powinien zostać uzupełniony definicjami symboli (są one silnie rozproszowe we wcześniejszych partiach tekstu).

- §4.3.1 (*The setup*): potencjał określany nazwą ekranowanego potencjału Kulomba (*screened Coulomb potential*) znany jest szerzej pod nazwą potencjału Yukawy.

- §4.3.2 (*Liquid-to-crystal transition*): zdanie *"There is no clear threshold filling factor for the Wigner crystallization, the transition is rather continuous."* jest mało precyzyjne. Zapewne, rozważany układ jest po prostu zbyt mały, aby można było zaobserwować klarowne oznaki przejścia fazowego zachodzącego w granicy termodynamicznej. Przejrzystości tekstu nie służy również — praktykowane także w kilku innych miejscach — pomieszanie prezentacji wyników z ich dyskusją.

- W opisie Rys. 4.20: skrót "PCD" pojawia się bez objaśnienia.

Należy podkreślić, że przedstawiona wyżej seria drobnych uchybień — biorąc pod uwagę długość pracy — musi zostać uznana za krótką, i w najmniejszym stopniu nie podważa wartości pracy. O staranności doktoranta przekonuje także fakt, że w całym tekście pracy udało mi się znaleźć tylko jeden błąd literowy (s.133, "*strengyh*" zamiast *strength*).

**Uwagi końcowe**

Bez wątpienia, w swojej pracy doktorskiej mgr inż. Błażej Jaworowski podejmuje aktualny i ciekawy temat badawczy, jakim jest próba uzupełnienia klasyfikacji faz topologicznych występujących w fizyce materii skondensowanej o przypadki, w których rola oddziaływań (także dalekozasięgowych) jest istotna. Doktorant musiał dobrze opanować kilka istotnie różnych metod obliczeniowych, jak również przeprowadzić analizę wyników dla szeregu zróżnicowanych modeli matematycznych (modele spinowe oraz fermionowe dla sieci jedno- i dwuwymiarowych), których wspólnymi cechami była silna przewaga energii potencjalnej nad energią kinetyczną kwazicząstek jak również nietrywialny ładunek topologiczny charakteryzujący pasma energetyczne. Taki program naukowy należy uznać za ambitny, a wymierny wynik w postaci czterech artykułów opublikowanych w bardzo dobrych czasopismach fizycznych przed złożeniem pracy zasługuje na uznanie.

Chociaż pewne cechy samej rozprawy doktorskiej mogą utrudniać lekturę, jej przygotowanie z pewnością nie było łatwe, chociażby z uwagi na silne zróżnicowanie materiału do prezentacji. Należy zatem uznać, że doktorant wywiązał się także z tego zadania w sposób zadowalający.

Wśród szeregu interesujących wyników fizycznych przedstawionych w rozprawie zwraca uwagę koncepcja realizacji kubitu z wykorzystaniem fazy Haldane'a w łańcuchu kropek kwantowych. Co prawda stan takiego kubitu musiałby być kontrolowany za pośrednictwem pola magnetycznego, a pojawia się także wątpliwość

w kwestii skalowalności układu (*jak zrealizować więcej kubitów i kontrolować ich wzajemne sprzężenia?*); jednak szereg cech proponowanego układu (ochrona topologiczna stanów, kolektywny charakter stanu wielociałowego gwarantujący odporność na zaburzenia zewnętrzne) wygląda obiecująco.

Autor przedstawił także mechanizm otwierania przerwy energetycznej rozdzielającej pasma, z których co najmniej jedno ma nietrywialną topologię, na przykładzie dwuwymiarowego modelu Lieba, w którym pojawia się faza ułamkowego izolatora Cherna (z wypełnieniem 1/3). Szereg wyników dotyczących m.in. wzbudzeń międzypasmowych w układzie efektywnie jednowymiarowym ("cienki torus") czy też współzawodnictwa faz izolatora Cherna i kryształu Wignera w modelach dwuwymiarowych zostało niestety przedstawione raczej skrótowo, co nie ułatwia oceny odpowiednich części pracy. Bez wątpienia, wyniki poparte są jednak zaawansowanymi i w pełni profesjonalnymi obliczeniami numerycznymi, a ich bardziej przejrzysta interpretacja nie będzie trudna.

W podsumowaniu, jestem przekonany, że przedstawiona mi do oceny praca spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Adam Rycerz