



Wrocław, 16.01.2026

Dr hab. inż. Jarosław Pawłowski
Instytut Fizyki Teoretycznej, Politechnika Wrocławska
Wyb. S. Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław

Ocena rozprawy doktorskiej pani magister inż. Weroniki Klaudii Pasek pt. *Quantum Simulation of Strongly Correlated Phases in Low-Dimensional Solid-State Systems*

Recenzję podzieliłem na dwie części: pierwszą – ogólną, zawierającą opinię i podsumowanie całej pracy, oraz drugą, zawierającą bardziej szczegółowy przegląd kolejnych rozdziałów.

Opinia ogólna

Wstęp. Tematem rozprawy doktorskiej są **symulatory kwantowe w ciele stałym jako alternatywna platforma do badania silnie skorelowanych faz kwantowych**. Tematyka ta doskonale wpisuje się w aktualne trendy współczesnej fizyki materii skondensowanej i fizyki kwantowej. Już kilka lat temu środowisko zajmujące się nanoskopowymi strukturami półprzewodnikowymi, w szczególności bramkowanymi kropkami kwantowymi na bazie materiałów dwuwymiarowych, zdało sobie sprawę, że realizacja pełnoskalowego komputera kwantowego jest wciąż przedwczesna. W konsekwencji znaleźliśmy się w epoce tzw. *noisy intermediate-scale quantum (NISQ) computing*, w której naturalną i obiecującą alternatywą aplikacji stały się badania nad kwantowymi symulatorami układów wielu ciał. Z drugiej strony, symulowanie układów silnie skorelowanych na komputerach klasycznych napotyka fundamentalne ograniczenia związane z wykładniczym wzrostem przestrzeni Hilberta (tzw. "ścianę wykładniczą"). Budowa fizycznych symulatorów modeli wielociałowych jawi się więc jako atrakcyjna i perspektywiczna ścieżka badawcza. Prezentowana rozprawa w pełni wpisuje się w ten nurt.

Struktura pracy. Pierwsze wrażenie z lektury pracy jest bardzo pozytywne. Rozprawa ma **przejrzystą i dobrze przemyślaną strukturę**, jasno sformułowane cele badawcze, klarownie zdefiniowane platformy fizyczne oraz dobre osadzenie w kontekście znanych zjawisk fizyki silnie skorelowanych faz kwantowych. Praca prezentuje bogactwo metod teoretycznych i analizowanych zjawisk, a jednocześnie nie jest przesadnie obszerna. Po odjęciu spisów i dodatków zasadniczy tekst liczy dokładnie 101 stron, co świadczy o dużej dyscyplinie autorki: praca zawiera dokładnie to, co istotne, bez zbędnych dygresji, i dzięki temu czyta się ją bardzo dobrze. Bogactwo rozprawy widoczne jest już na poziomie zastosowanych platform symulacyjnych, do których należą:

- heterostrukтуры moiré z dichalkogenków metali przejściowych (TMDC), w których efektywny potencjał moiré prowadzi do powstawania sieci zlokalizowanych kropek kwantowych o oddziaływaniach kontrolowanych przez względny skręt monowarstw,
- grafenowe nanostrukтуры, w szczególności łańcuchy nanografenowe zbudowane z jednostek triangulenu (sumaryczny spin 1 modów zerowych) oraz fenalenylu (spin $\frac{1}{2}$).

Równie imponujący jest zastosowany warsztat teoretyczny i numeryczny, pokazujący już dosyć spore doświadczenie doktorantki w badaniu układów nanoskopowych w formalizmie ciasnego wiązania rozszerzonym o opis wielociałowy, obejmujący m.in.:

- dokładną diagonalizację,
- obliczanie elementów macierzowych oddziaływania w przestrzeni rzeczywistej,
- metodę oddziaływania konfiguracji,
- metodę Hartreego-Focka,
- efektywne modele Hubbarda,
- efektywne niskoenergetyczne modele spinowe z wymianą "na pierścieniu" (*ring exchange*),
- analizę entropii splątania,
- odniesienia do modelu AKLT.

Po trzecie, rozprawa charakteryzuje się dużą różnorodnością badanych efektów fizycznych, związanych z bogatą analizą występujących tam silnie skorelowanych faz kwantowych, takich jak:

- uogólnione kryształy Wignera,
- sygnatury polaryzacji spinowej indukowanej mechanizmem Nagaoki,
- nematyczna faza typu *valence bond solid*,
- kwantowe ciecze spinowe,
- faza Haldane'a (skończona przerwa Haldane'a, zlokalizowane stany brzegowe),
- fazy topologiczne chronione symetrią charakteryzujące się splątaniem krótkozasięgowym.

Zawartość pracy. Rozprawa zawiera dwa rozdziały wprowadzające. Pierwszy stanowi przegląd kanonu wiedzy dotyczącej układów silnie skorelowanych, drugi natomiast omawia metody (głównie numeryczne) stosowane do ich badania. Co istotne, oba rozdziały uwzględniają współczesne zagadnienia i aktualne podejścia badawcze. Wstęp pełni rolę dobrze napisanego, choć siłą rzeczy selektywnego, przewodnika po nowoczesnych metodach numerycznych w fizyce układów silnie skorelowanych i jest bardzo użyteczny dydaktycznie. Ze względu na to praktyczne wprowadzenie, a także świetny opis metod w dalszej części, umieszczę tę rozprawę nie wśród wielu innych prac studenckich, ale w specjalnym folderze na pulpicie z ulubionymi podręcznikami. Rozdziały 3-6 zawierają zasadniczą część rozprawy, czyli **oryginalne wyniki badań**. Do najważniejszych oryginalnych osiągnięć doktorantki, poza rozwojem metodologii omówionej w rozdziale 3, należą:

1. obserwacja ferromagnetyzmu Nagaoki w dwuwymiarowym symulatorze modelu Hubbarda zrealizowanym na sieci kilkunastu kropek moiré,
2. identyfikacja molekuly Wignera w tych samych strukturach,
3. obserwacja i charakterystyka ferromagnetycznej fazy typu *valence bond solid* (VBS) dla słabszych oddziaływań w symulatorach spinowych na sieci moiré,
4. identyfikacja nematycznej cieczy spinowej w symulatorach spinowych na sieci moiré dla pośrednich wartości ekranowania dielektrycznego,
5. pierwsze systematyczne zbadanie własności elektronowych i magnetycznych łańcuchów trójkątnych kropek grafenowych zbudowanych z triangulenów i fenalenylów, w tym ujawnienie się topologicznej fazy Haldane'a w łańcuchach mieszanych: triangulen-fenalenyl-fenalenyl.

Szczególnie punkt piąty zasługuje na podkreślenie ze względu na potencjalne znaczenie aplikacyjne. Jest to bowiem wyraźna próba pokazania, jak i gdzie możliwe jest projektowanie topologicznych stanów spinowych, co jest kluczowe z punktu widzenia realizacji topologicznego komputera kwantowego.

Uwagi ogólne i pytania do dyskusji. W tej części przedstawiam kilka uwag, które nasuwają się po lekturze rozprawy, ale muszę podkreślić, że ich ilość nie ma na celu umniejszenia mojej wysokiej oceny prezentowanej pracy, a wręcz przeciwnie jest wyrazem żywego zainteresowania. Nie wszystkie są warte poszerzonej dyskusji i decyzję, do których z nich warto się odnieść, pozostawiam doktorantce:

1. Na ile zaproponowane precyzyjne kąty skręcenia i konfiguracje heterostruktur moiré są łatwe w realizacji? Czy proponowane struktury łańcuchów trójkątnych kropek grafenowych są łatwe do zsyntetyzowania – metodą eksfoliacji, depozycji z fazy gazowej, czy może inną?
2. W trójkątnych kropkach grafenowych (13- i 22-atomowych) wyizolowane mody zerowe mają określony całkowity spin i mogą służyć do budowy łańcucha spinowego. Powstaje pytanie:
 - o jak zapewniane jest ich obsadzenie i separacja energetyczna od reszty spektrum,
 - o w przypadku triangulenu spin całkowity $S=1$ wynika z sumy dwóch modów $S=1/2$ – na ile jest to rzeczywisty spin 1, a na ile układ singlet-tryplet?
3. W procedurze mapowania oddziałujących dziur na sieci moiré na model Hubbarda pojawiają się dodatkowe wyrazy (U_1 , X_1 , czy A_1). Jaka jest procedura ich wyboru i dlaczego nie uwzględnia się kolejnych? Skąd wynika asymetria całek przeskoku widoczna na rys. 4.3?
4. W rozdziale 4.3.1 analizowane jest lokalne obsadzenie fragmentu supersieci dziurami. Jak eksperymentalnie można uzyskać tak silnie niejednorodne obsadzenie znacznie większej sieci moiré?
5. Analiza uogólnionego kryształu Wignera (rozdział 4.3.3) opiera się na rozkładzie gęstości ładunku. Standardowo jednak do identyfikacji kryształu Wignera analizuje się funkcję korelacji par – dlaczego nie zastosowano tego podejścia?
6. W analizie faz nematycznych w symulatorach spinowych nie jest do końca jasna różnica pomiędzy *dimer structure factor* a spinowym czynnikiem strukturalnym. Nie w pełni wyjaśniono także kryterium identyfikacji fazy nematycznej dla dość arbitralnego $\epsilon = 14$ oraz kryterium przejścia do fazy VBS dla silniejszego ekranowania.

Podsumowanie. Rozprawę przeczytałem z dużą przyjemnością. Choć porusza ona zjawiska znane z fizyki układów silnie skorelowanych, ich przedstawienie w nowoczesnym kontekście, z uwzględnieniem aktualnie badanych platform do realizacji symulatorów kwantowych, pozwala spojrzeć na te efekty w nowym świetle. Czyni to pracę bardzo atrakcyjną poznawczo.

Doktorantka wykazała się bardzo dobrą znajomością zaawansowanej metodologii budowy modeli wielociałowych w formalizmie drugiej kwantyzacji i swobodą w jej stosowaniu. Nie tylko potrafi budować złożone modele tych struktur – hamiltoniany, ale także badać ich własności poprzez numeryczną diagonalizację, zarówno poprzez metody dokładne jak i przybliżone, ale pozwalające opisać dużo większe układy. W mojej opinii jest to doskonała inwestycja w jej dalszą karierę naukową. W świecie, w którym coraz częściej korzysta się bezrefleksyjnie z gotowych bibliotek numerycznych, świadomość metod i ich ograniczeń jest cechą dojrzałego badacza.

Głównym wnioskiem płynącym z rozprawy jest obserwacja, że realistyczne symulatory kwantowe istotnie różnią się od wyidealizowanych *toy models* dających model Hubbarda czy Heisenberga w standardowej konfiguracji przeskoku/oddziaływań pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Rzeczywiste symulatory muszą uwzględniać wyrazy dalej-zasięgowe. Ta specyfika może być wadą, gdy ogranicza kontrolę nad parametrami, ale może być też zaletą, ponieważ prowadzi do niezwykle bogatej fizyki – czego liczne przykłady dostarcza niniejsza praca. **Symulatory kwantowe w ciele stałym mogą realizować szeroką gamę silnie skorelowanych i topologicznych faz kwantowych.**

Na marginesie należy odnotować, że dorobek publikacyjny doktorantki obejmuje dwa artykuły w bardzo dobrych czasopismach: *Nano Letters* i *Physical Review B*, przy czym rozdział 5 nie jest bezpośrednio powiązany z publikacją, co może dawać poczucie niedosytu, zwłaszcza że prezentowany w rozprawie materiał jest bardzo bogaty. Jednakże szybkie sprawdzenie pokazuje, że doktorantka jest także współautorką w dwóch kolejnych pracach (aktualnie w recenzji), co czyni finalny dorobek publikacyjny z doktoratu zadowalającym. Mimo tej uwagi, **rozprawa spełnia z naddatkiem wszystkie wymogi stawiane pracom doktorskim** (Ustawa prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z 20 lipca 2018 r. z późn. zm.) i stanowi wartościowy wkład w rozwój badań nad symulatorami kwantowymi w ciele stałym. Dlatego wnioskuję o dopuszczenie pani Weroniki Pasek do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Zgodnie z przepisami Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu w sprawie wyróżnień rozpraw doktorskich, chciałbym także **wnioskować o wyróżnienie niniejszej rozprawy**. Powodem jest duży rozmach badań w bardzo aktualnej dziedzinie, przejawiający się różnorodnością badanych platform materiałowych i wielością opisywanych zjawisk fizycznych, udokumentowany dorobkiem publikacyjnym w bardzo dobrych czasopismach, gruntowne opanowanie wszystkich aspektów bardzo złożonych metod obliczeniowych, a przede wszystkim osobisty i oryginalny wkład doktorantki w rozwój metod teoretycznych.

Opinia szczegółowa

Rozprawa rozpoczyna się bardzo dobrze przygotowanym pierwszym wstępem, w którym autorka osadza temat pracy w historycznym i współczesnym kontekście fizyki układów silnie skorelowanych. Omówione zostają klasyczne koncepcje, takie jak izolator Motta, oraz ich nowoczesne realizacje w materiałach dwuwymiarowych. Przedstawiono klarowne rozróżnienie pomiędzy fazami topologicznymi chronionymi symetrią (*symmetry-protected topological phases*) a topologicznym uporządkowaniem *intrinsic*, niewymagającym symetrii, charakteryzowanym przez dalekozasięgowe splątanie. Następnie omówiona zostaje fizyka łańcuchów spinowych – od standardowego modelu Heisenberga po jego uogólnienia – zarówno dla spinów połowkowych, jak i całkowitych. Dla tych drugich zaprezentowany jest model bilinear–biquadratic (BLBQ), ilustrujący bogactwo faz i przejść fazowych, w szczególności fazę Haldane’a, opisaną w kontekście modelu AKLT. Wstęp uzupełniają krótkie, lecz trafne omówienia efektu Kondo oraz ułamkowego efektu Halla.

Drugi wstęp stanowi dydaktyczny przegląd metod numerycznych stosowanych w badaniach układów silnie skorelowanych, z wyraźnym zaznaczeniem ich zalet i ograniczeń. Szczególnie dobrze przedstawiona jest idea symulatorów kwantowych oraz przegląd platform materiałowych w systemach 2D. Duży nacisk położono na skrócone heterostrukтуры van der Waalsa z dichalkogenków metali przejściowych (TMDC), ze względu na ich wysoką kontrolowalność poprzez kąt skręcenia, prowadzącą do powstawania płaskich pasm, w których oddziaływania kulombowskie dominują nad energią kinetyczną. Omówiono pierwsze wyniki eksperymentalne dla symulatorów moiré opartych na TMDC, grafenie i hBN, wskazując na możliwość realizacji zjawisk takich jak topologiczne nadprzewodnictwo, ferromagnetyzm Stonera, stany typu Chern insulator, a także silnie skorelowane fazy wielu ciał, w tym cieczy spinowe i kryształy Wignera. Z punktu widzenia symulatorów kwantowych platformy te są najczęściej wykorzystywane do realizacji fizyki dwuwymiarowego modelu Hubbarda. Drugą obiecującą platformą są nanostrukтуры grafenowe, w których lokalizacja węzłów sieci symulatora wynika z precyzyjnie zaprojektowanej geometrii – regularnych układów kropek, dziur lub wstążek. Szczegółowo omówione są trójkątne grafenowe kropki kwantowe z brzegami typu zygzak, których własności spinowe i mody zerowe czynią je dobrymi kandydatami do budowy symulatorów spinowych.

Rozdział trzeci poświęcony jest metodologii numerycznej stosowanej w pracy. Podstawowym narzędziem jest metoda dokładnej diagonalizacji hamiltonianów ciasnego wiązania. Doktorantka jasno omawia jej fundamentalne ograniczenia związane z wykładniczym wzrostem przestrzeni Hilberta, a jednocześnie pokazuje, w jaki sposób rzadkość macierzy hamiltonianu, odpowiednia reprezentacja w pamięci oraz koncentracja na wybranych fragmentach widma umożliwiają efektywne obliczenia. Przedstawiony zostaje sposób konstrukcji hamiltonianu w formalizmie oddziaływania konfiguracji na przykładzie modelu Hubbarda, z podkreśleniem roli symetrii, które prowadzą do blokowej struktury przestrzeni Hilberta i redukcji efektywnego rozmiaru problemu. Omówiona notacja bitstringów oraz algorytm Lanczosa świadczą o bardzo dobrej znajomości detali implementacyjnych. Uzupełnieniem są przybliżone metody, takie jak DMRG oraz współczesne podejścia oparte na

stanach produktowych (MPS/MPO). Autorka wykazuje w tym rozdziale dużą swobodę i dojrzałość metodologiczną.

Rozdział czwarty zawiera pierwszą część oryginalnych wyników i dotyczy skręconych heterostruktur TMDC jako realizacji sterowalnego symulatora modelu Hubbarda na trójkątnej supersieci moiré. Pokazano pełną ścieżkę od modelu kontinuum dla nośników w jednej dolinie, poprzez konstrukcję stanów Blocha i Wanniera, aż do wyznaczenia parametrów efektywnego modelu Hubbarda. Następnie analizowane są własności magnetyczne silnie skorelowanych dziur w skończonych fragmentach supersieci moiré dla różnych wypełnień i kątów skręcenia. Uzyskano silną polaryzację spinową tuż powyżej pojedynczego wypełnienia, zgodną z mechanizmem ferromagnetyzmu Nagaoki, oraz sygnatury formowania się molekuł Wignera, wykazujących odporność na niewielkie zmiany kąta skręcenia. [Wyniki z tego rozdziału opublikowano w *Physical Review B* **108**, 165152 (2023)].

Rozdział piąty poświęcony jest budowie symulatorów spinowych na sieci moiré. Omówione są warunki (kąt skręcenia, ekranowanie), przy których możliwa jest realizacja reżimu jednocząstkowego na każdej kropce i separacja energetyczna stanów z podwójnym obsadzeniem. Przeprowadzona zostaje transformacja Schrieffer-Wolffa (do podprzestrzeni pojedynczych wypełnień), prowadząca do efektywnego hamiltonianu spinowego zawierającego – oprócz standardowych wyrazów – istotne oddziaływania wyższych rzędów, w tym niezwykle ciekawe cztero-spinowe wyrazy wymiany na pierścieniu. Na podstawie obliczeń DMRG wyznaczono diagram fazowy w funkcji siły ekranowania, identyfikując fazy ferromagnetyczne, nematyczne oraz typu VBS. Pokazano, że pominięcie pozornie egzotycznych wyrazów wymiany na pierścieniu prowadzi do jakościowo odmiennych wyników, co podkreśla ich kluczową rolę w realistycznych symulatorach.

Rozdział szósty dotyczy alternatywnej platformy materiałowej: łańcuchów trójkątnych grafenowych kropek kwantowych. Pokazano, że kontrolowana liczba modów zerowych w takich kropkach prowadzi do efektywnych stopni swobody o określonym spinie całkowitym. Połączenie kropek w łańcuchy umożliwia realizację symulatorów spinowych. Autorka stosuje tu podejście Hartree-Focka rozszerzone o dokładny opis korelacji w niskoenergetycznej podprzestrzeni, a następnie mapuje układ na efektywne modele spinowe typu bilinear-biquadratic. Dla łańcuchów mieszanych triangulen-fenalenyl-fenalenyl wykazano bardzo dobrą zgodność pomiędzy opisem w ramach dokładnej diagonalizacji a efektywnym hamiltonianem Heisenberga. Dyskutowane są rozmaite techniki by zredukować numeryczny koszt modelowania łańcuchów mieszanych – głównie wykorzystując symetrię C_3 nanokropek. Analiza długich łańcuchów wskazuje na pojawienie się topologicznej fazy Haldane'a, potwierdzonej niezerowym nielokalnym parametrem porządku oraz analizą entropii splątania. [Wyniki z tego rozdziału opublikowano w *Nano Letters* **24**, 7417 (2024)].

Praca uzupełniona jest dwoma dodatkami: jednym poświęconym rozwinięciu t/U dla modelu Hubbarda metodą Schrieffer-Wolffa oraz drugim wprowadzającym metodę oddziaływania konfiguracji. Rozprawa zawiera również bardzo bogatą i aktualną literaturę. Zauważyłem drobne typy w równaniach: 3.4, 3.14, oraz na stronie 78: "Figure ...". W rozdziale 6 ekranowanie nagle staje się kappą.