



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii AGH

Kraków, 20.01.2026

dr hab. Michał Zegrodnik
Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii
Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Recenzja rozprawy doktorskiej magister Weroniki Pasek pt. „Quantum Simulation of Strongly Correlated Phases in Low-Dimensional Solid State Systems”

Przedłożona rozprawa doktorska mgr Weroniki Pasek została wykonana na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Toruniu pod kierunkiem dr hab. Pawła Potasza, prof. UMK, a promotorem pomocniczym był prof. dr hab. Michał Zieliński. Praca ma charakter teoretyczny i dotyczy tematyki fizyki silnie skorelowanych faz w układach niskowymiarowych. W szczególności rozważane są grafenowe nanostruktury oraz układy typu moiré oparte o dichalkogenki metali przejściowych, w których jak wykazano mogą być realizowane uogólnione kryształy Wignera, ciecze spinowe oraz stany topologiczne. Przeprowadzone badania wskazują, że rozważane układy mogą pełnić rolę kontrolowanych platform służących do analizy silnie skorelowanych oraz topologicznych faz materii.

Rozprawa zawiera wstęp do rozważanej tematyki badawczej (rozdziały 1 oraz 2), opis zastosowanej metodologii (rozdział 3), szczegółową analizę otrzymanych wyników (rozdziały 5-7) oraz konkluzje (rozdział 7). Dodatkowo na końcu zamieszczono dwa uzupełnienia, które zawierają część użytecznych wyprowadzeń związanych z formalnym opisem analizowanych zjawisk oraz metodologią. Całość rozprawy zawiera 140 stron.

W pierwszym rozdziale opisane są podstawowe zjawiska silnie skorelowane oraz topologiczne w wybranych ciałach stałych. Rozdział ten w sposób systematyczny przedstawia najważniejsze odkrycia eksperymentalne oraz istotne koncepcje teoretyczne dotyczące między innymi izolatorów Motta, izolatorów Cherna, łańcuchów spinowych oraz efektu Kondo. Rozdział drugi skupia się na układach, które dzięki wysokiemu stopniowi kontrolowalności mogą pełnić rolę tak zwanych symulatorów kwantowych. Opisywane są różnego rodzaju struktury typu moiré (homo- i hetero-struktury) oraz nanostruktury grafenowe i sztuczne sieci atomów wytwarzane za pomocą techniki STM. Własności tych układów mogą być w dużym stopniu modulowane, co powoduje, że mają one duży potencjał jeżeli chodzi o eksperymentalną weryfikację różnych koncepcji teoretycznych jak również mogą prowadzić do różnorodnych zastosowań. Obydwa rozdziały w klarowny sposób wprowadzają czytelnika w tematykę oraz cechują się dobrymi proporcjami między poziomem ogólności oraz uszczegółowienia opisu. To wskazuje na szeroki zakres wiedzy autorki w dziedzinie oraz umiejętność prezentacji naukowej wiedzy w klarowny sposób.

Rozdział trzeci przedstawia metodologię jaka stosowana była do obliczeń, których wyniki omawiane są w pozostałej części rozprawy. Autorka początkowo przedstawia podstawy teoretycznego opisu układów oddziaływujących, cechującą ich specyfikę oraz wynikające z niej wyzwania. Autorka skupia się tutaj na dwóch metodach. Jedną to diagonalizacja w oparciu o algorytm Lanczosa, natomiast druga metoda opiera się o grupę renormalizacji macierzy gęstości (DMRG). Jako przykłady ilustrujące wspomniane metody wybrano model Hubbarda oraz model Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT).

Kolejne trzy rozdziały odnoszą się do prezentacji wyników jakie zostały otrzymane w ramach prowadzonych badań i stanowią centralną część doktoratu. Poniżej omówię w skrócie najważniejsze aspekty przeprowadzonych badań.

W rozdziale 4 rozważane są heterostruktury $WSe_2/MoSe_2$ które dzięki kątowi skręcenia między warstwami monoatomowymi tworzą sieć moiré. W celu wyprowadzenia Hamiltonianu Hubbarda opisującego górne pasmo walencyjne rozważanego układu, posłużono się tak zwanym modelem ciągłego potencjału moiré ("continuum model") a następnie przeprowadzono Wannieryzację. Otrzymany w ten sposób efektywny oddziałujący Hamiltonian poddano diagonalizacji dla przypadku skończonych układów składających się z 7, 9, oraz 12 orbitali moiré, tak aby przeanalizować wpływ efektów brzegowych na

wyznaczony stan podstawowy. Pierwszym wynikiem tej części analizy jest otrzymanie stanu spolaryzowanego spinowo w okolicy połowy wypełnienia elektronami dla odpowiednio niskiej stałej dielektrycznej (czyli silnych oddziaływań) oraz odpowiednio małego kąta skręcenia. Wynik ten jest zinterpretowany jako wyindukowany wyrazem oddziaływań wymiennych typu ferromagnetycznego jaki występuje w wyznaczonym wcześniej Hamiltonianie. Natomiast jak pokazuje dalsza przeprowadzona analiza swój wkład na otrzymany efekt może mieć także mechanizm oparty o ferromagnetyzm typu Nagaoki. Niemniej jednak występowanie tego ostatniego jest zilustrowane na uproszczonym modelu, w którym oddziaływania ograniczają się do wyrazu na węzłowego, a amplitudy przeskoku elektronów są niezerowe jedynie dla najbliższych sąsiadów. To że stan spolaryzowany spinowo występuje jedynie poniżej pewnego krytycznego kąta skręcenia autorka interpretuje w oparciu o fakt, że różnice w energiach między jednoelektronowymi stanami rosną ze wzrostem kąta co przekracza skalę oddziaływań wymiennych. Natomiast należy zwrócić uwagę że oddziaływania wymienne także rosną dla rosnących kątów co mogłoby jednak kompensować opisany efekt. Czy można pokazać w sposób bardziej ilościowy, że faktycznie wspomniany mechanizm jest odpowiedzialny z otrzymany wynik?

Drugim istotnym efektem jaki jest pokazany w tej części analizy jest formowanie się molekuł Wignera. Takiego zjawiska można się spodziewać w rozważanym układzie ponieważ oddziaływania między-węzłowe są znacząco większe od wkładu energetycznego pochodzącego z wyrazu kinetycznego. Co ciekawe, przeprowadzone obliczenia pokazują, że dla określonej geometrii układu oraz określonych kątów skręcenia, tworzeniu się molekuł Wignera towarzyszyć może uporządkowanie magnetyczne. Ostatnim etapem tej części analizy jest porównanie sytuacji rozważanej wcześniej dotyczącej układów skończonych z wynikami otrzymanymi przy zastosowaniu periodycznych warunków brzegowych. Jak zostało pokazane obie sytuacje prowadzą do podobnych wyników jeżeli chodzi o własności magnetyczne w okolicy układu wypełnionego elektronami do połowy. Natomiast, bardziej istotne różnice są widoczne w kontekście efektu tworzenia się stanów Wignera dla ułamkowego wypełnienia układu. Jak komentuje autorka w sytuacji skończonego układu przeważnie ładunki gromadzą się na krańcach aby zminimalizować energię oddziaływań. Dla układu z periodycznymi warunkami brzegowymi ten efekt

związany z brzegiem nie występuje co prowadzi do zaobserwowanych różnic. Przy okazji omawiania tej części rozprawy nasuwa się pewna wątpliwość. Mianowicie, w rozdziale 4.4 autorka posługuje się pojęciem „continuum model” odnosząc się, jak sądzę, do układów z periodycznymi warunkami brzegowymi przy zastosowaniu wcześniej wyprowadzonego jednopasmowego Hamiltonianu Hubbarda. Tak wynikałoby z podpisu rysunku 4.8, natomiast nie jest to nigdzie jawnie zdefiniowane w tekście co powoduje, że czytelnik nie bardzo potrafi stwierdzić co stoi za wspomnianym pojęciem. Dodatkowo jeżeli faktycznie „continuum model” ma tutaj znaczyć po prostu ten sam układ i ten sam model co wcześniej tylko z periodycznymi warunkami brzegowymi to uważam że jest to mylące ponieważ „continuum model” w kontekście rozważanej tematyki odnosi się do pewnego przybliżenia jakie wykonuję się przy wyprowadzaniu wielopasmowej struktury elektronowej. Autorka sama posługuje się tą metodologią nazywając ją „continuum model” w rozdziale 4.1. Natomiast to samo sformułowanie chyba użyte jest w zupełnie innym znaczeniu zarówno w tytule jak i treści rozdziału 4.4. Ta kwestia może zostać wyjaśniona podczas obrony rozprawy doktorskiej.

W rozdziale 5 rozważania rozszerzone zostały na układy o większych rozmiarach. Ze względu na występującą w takim przypadku znaczną złożoność obliczeniową wyprowadzony został efektywny model spinowy dla układu wypełnionego do połowy. Przed rozpoczęciem obliczeń przeprowadzono dość szczegółową analizę stosowalności takiego podejścia oraz wybrano parametry układu tak aby efektywny model w wystarczająco dobry sposób opisywał fizykę stanów spinowych. W tej części pracy skupiono się na wyznaczeniu stanu układu w zależności od wartości stałej dielektrycznej, która determinuje jak silne będą oddziaływania kulombowskie między elektronami w układzie. Na szczególne podkreślenie zasługuje identyfikacja trzech odmiennych faz układu przy zmniejszaniu wartości stałej dielektrycznej, otrzymana z wykorzystaniem metody DMRG i obejmująca uporządkowany stan wiązań walencyjnych, kwantową ciecz spinową oraz stan spolaryzowany spinowo. W szczególności interesującym elementem pracy jest szczegółowa analiza przejścia fazowego pomiędzy stanem wiązań walencyjnych a kwantową cieczą spinową, oparta na obliczeniach entropii splątania. Natomiast pytaniem jakie często nasuwa się przy okazji tego typu obliczeń jest wpływ rozmiaru układu. Czy dla stosowanej metody DMRG rozważany układ 8×4 jest górną granicą jeżeli chodzi o przeprowadzenie obliczeń

w rozsądnym czasie oraz czy da się określić na ile wynik przedstawiony na rysunku 5.4 zależy od rozmiaru układu.

W kolejnym rozdziale rozważania skupiają się wokół układów składających się z trójkątnych kropek kwantowych na bazie grafenu. W pierwszej części analizy wyznaczono widma energetyczne układów kropek kwantowych o tych samych rozmiarach oraz układów składających się z kropek o dwóch różnych rozmiarach. W obydwu przypadkach udało się zaproponować efektywny model spinowy, który prowadzi do dobrej zgodności poszczególnych poziomów energetycznych oraz odpowiadających im stanów spinowych z tymi jakie wynikają z modeli fermionowych. To pozwala stwierdzić, że otrzymane widmo jest w dominujący sposób zdeterminowane przez zjawisko nadwymiany stowarzyszone z wirtualnymi procesami przeskoków elektronów. Następnie wykonano obliczenia dla stosunkowo długich łańcuchów składających się z kropek kwantowych o dwóch różnych rozmiarach przy użyciu metody DMRG, gdzie zidentyfikowano przerwę energetyczną o charakterze topologicznym oraz ułamkowe stany brzegowe. Co więcej wyznaczony nie-lokalny parametr porządku wskazując na występowanie w otrzymanym stanie silnego ukrytego uporządkowania antyferromagnetycznego. Otrzymane wartości nie-lokalnego parametru porządku oraz wyznaczone „spektra splątania” dla modelu są porównywalne z wybranymi modelami kanonicznymi dla których również przeprowadzono obliczenia i potwierdzają one charakter typowy dla topologicznej fazy Haldane. W ostatniej partii wyników autorka pokazuje, że w rozważanych układach możliwa jest kontrolowana zmiana charakterystycznej długości korelacji w otrzymanym stanie topologicznym poprzez zmianę ilości kropek o spinie $\frac{1}{2}$ oddzielających kropki o spinie 1. Wynik ten jest interesujący w kontekście potencjalnych zastosowań w informatyce kwantowej gdzie pożądana jest realizacja przestrzennie odseparowanych od siebie stanów brzegowych. Przy okazji tej części analizy nasuwa się pytanie dotyczące ograniczeń zastosowanej metodologii. Mianowicie, czy dla rozważanej długości łańcuchów metoda DMRG może wciąż dać wynik w rozsądnym czasie dla modelu określonego przez równanie 6.16, który w sposób jawny posiada zarówno przeskoki elektronów oraz oddziaływanie Coulomba? W ten sposób możliwe byłoby także badanie stanów z uporządkowaniem ładunkowym oraz przeanalizowanie innych wartości koncentracji ładunku w układzie. Spinowy model efektywny niestety nie daje takiej możliwości. Ponadto według mnie w tym rozdziale wystąpiły dwie

niejasności. Mianowicie, na stronie 85 autorka odnosi się w tekście do równanie 6.5 jako do tego, które opisuje Hamiltonian dla rozważanego układu. Natomiast równanie to pojawia się dopiero dwie strony dalej i przedstawia Hamiltonian już po przejściu do bazy orbitali pochodzących z przybliżenia Hartree-Focka. Być może numer równania powinien być inny w tym miejscu? Ponadto w rozdziale 6.3 autorka pisze, że do analizy łańcuchów o różnej długości z komórką elementarną zaprezentowaną na rysunku 6.5 (b) zastosowano Hamiltonian 6.26. Zastanawia mnie dlaczego do tej części analizy nie zastosowano Hamiltonianu 6.25, który zawiera pełny wkład do oddziaływań wymiennych (wyrazy J_2 oraz J_3). Wspomniany przez autorkę Hamiltonian 6.26 posiada jedynie wkład pochodzący od wyrazu J_2 . Być może to pomyłka w numeracji wzorów? Wyjaśnienie tych dwóch kwestii może odbyć się w czasie obrony pracy doktorskiej.

Podsumowując, przedłożona rozprawa stanowi spójne i wartościowe opracowanie, wnoszące istotny wkład w rozwój fizyki układów skorelowanych. autorka w przekonujący sposób pokazuje, że heterostruktury moiré oparte o dichalkogenki metali przejściowych oraz grafenowe układy kropek kwantowych umożliwiają realizację bogatej klasy faz silnie skorelowanych i topologicznych. Wyniki dotyczące stanów uporządkowanych magnetycznie, cieczy spinowych, czy molekuł Wignera pokazują, że układy kropek kwantowych typu moiré mogą stanowić naturalne rozszerzenie badań nad układami skorelowanymi w kierunku reżimów dla których coraz większe znaczenie zaczynają odgrywać oddziaływania dalekozasięgowe oraz efekty związane ze skończoną wielkością układu. Ponadto przedstawione badania nad łańcuchami grafenowych kropek kwantowych przekonująco potwierdzają możliwość realizacji topologicznej fazy Haldane'a i podkreślają potencjał projektowania topologicznych stanów spinowych w kontrolowany sposób. Kilka wątpliwości związane z opisem wyników jakie zasygnalizowałem w recenzji mogą zostać wyjaśnione lub skomentowane podczas obrony. Natomiast nie zmieniają one faktu, że całość przeprowadzonych badań cechuje wysoki poziom merytoryczny, praca stosuje zaawansowane metody obliczeniowe dedykowane do opisu układów oddziałujących, a wyniki są wartościowe i dobrze osadzone w szerszym kontekście.

Przedłożona rozprawa doktorska spełnia wszystkie zwyczajowe oraz prawne wymagania określone w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. (z późn. zm.) „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” do nadania stopnia doktora w dyscyplinie nauki fizyczne. Na tej podstawie wnioskuje do Rady Dyscypliny

Naukowej Nauki Fizyczne Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Toruniu o
dopuszczenie magister Weroniki Pasek do dalszych etapów postępowania
doktorskiego.

dr hab. Michał Zegrodnik