

Prof. dr hab. Tadeusz Domański  
Katedra Fizyki Teoretycznej  
Instytut Fizyki  
Uniwersytet M. Curie-Skłodowskiej  
20-031 Lublin

Lublin, 4 grudnia 2023 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej magister T. Paul pt.  
„Effect of excitons in quantum spin Hall effect”

Przedłożona rozprawa doktorska ma charakter teoretyczny i analizuje współczesne realizacje topologicznych faz materii. Główny aspekt koncentruje się na problematyce zjawiska Halla, a w szczególności na spinowym kwantowym zjawisku Halla oraz towarzyszących mu zjawiskach fizycznych. Praca doktorska została przygotowana w Międzynarodowym Centrum Badawczym MAGTOP w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. Promotorami są dr Timo Hyart i dr hab. Wojciech Brzezicki. Na zasadniczą treść rozprawy składa się blok wstępny z ogólnym zarysem zagadnienia (rozdziały 1-3), wyniki Doktorantki opublikowane w dwóch artykułach (rozdziały 4-5) oraz rozdział podsumowujący i bibliografia. Aktualny dorobek T. Paul obejmuje publikacje: Phys. Rev. B **106**, 235420 (2022); Phys. Rev. B **106**, 235421 (2022). Do wymienionych prac naukowych Doktorantka dołączyła oświadczenia współautorów. W dalszej części przedstawię przegląd poszczególnych fragmentów pracy, ze zwróceniem uwagi na oryginalne wyniki badań.

W rozdziale pierwszym Doktorantka podała podstawowe informacje o klasycznym zjawisku Halla oraz jego kwantowo-mechanicznej wersji, przejawiającej się w dyskretyzacji poprzecznego przewodnictwa elektrycznego. Kwantowanie przewodnictwa Halla skonfrontowała z eksperymentem myślowym Laughlina dotyczącym pompowania ładunku zaindukowanego dynamiką potencjału cechowania w perścieniu Corbino. Podkreśliła następnie związek kwantowego efektu Halla z obecnością kwazijednowymiarowych stanów brzegowych dwuwymiarowego gazu elektronowego w silnym polu magnetycznym i wskazała na ścisłą relację z niezmiennikami topologicznymi. Dla dwuwymiarowych stanów Blocha wprowadziła pojęcia Berry-ologii i podała jawne wyrażenie na przewodnictwo Halla poprzez iloczyn kwantu  $e^2/h$  z sumą liczby Cherna wypełnionych pasm. W nawiązaniu do tzw. *bulk-boundary correspondence* Doktorantka wskazała, że skwantowana wartość przewodnictwa (w zjawisku całkowitego kwantowego efektu Halla) jest powiązana z liczbą chiralnych stanów brzegowych.

Kolejnym zagadnieniem teoretycznym diskutowanym w podrozdziale 1.2 jest anomalny kwantowy efekt Halla realizowany w izolatorach Cherna. Doktorantka przytoczyła w tym kontekście scenariusz Haldane'a, opisujący model ciasnego wiązania elektronów na sieci o geometrii plastrów miodu z przeskokiem do najbliższych ( $t_1$ ) i kolejnych najbliższych ( $t_2$ ) węzłów. Pod wpływem zmiany strumienia pola magnetycznego przechodzącego przez komórkę elementarną oraz wartości całki przeskoku  $t_2$  może dojść do inwersji pasm w pobliżu punktów Diraca w I-iej strefie Brillouina. Zamknięcie i ponowne otwarcie przerwy energetycznej przekłada się na wartość liczby Cherna, co znajduje odzwierciedlenie w zmianie poprzecznego przewodnictwa. Alternatywny wariant realizacji kwantowego anomalnego efektu Halla zaproponowali Qi, Wu i Zhang w ramach dwupasmowego układu elektronów na sieci kwadratowej. Dwupasmowy charakter może wynikać z oddziaływania spin-orbita albo z wpływu orbitalnych stopni swobody. Zależnie od parametrów materiałowych (które determinują zależność dyspersyjną w pobliżu punktu  $\Gamma$ ) możliwa jest zmiana znaku członu masowego, prowadząc do inwersji pasm. Doktorantka podkreśliła, że zarówno w modelu Haldane'a jak też w scenariuszu Qi-Wu-Zhanga przejście topologiczne jest spowodowane łamaniem symetrii odwracalności w czasie i nie ma żadnego związku z obecnością poziomów Landauowskich.

Następny fragment (podrozdział 1.3) poświęcony jest spinowemu kwantowemu zjawisku Halla. Doktorantka przedstawiła model teoretyczny zaproponowany przez Kane'a i Mele dla elektronów na sieci grafenowej oddziałujących poprzez spinowo-orbitalne sprzężenie Rashby. W wyniku takiego oddziaływania w układzie pojawia się faza topologiczna charakteryzowana niezmiennikiem  $Z_2$ , określającym liczbę par helikalnych kwazicząstek brzegowych. Te przeciwbieżne mody brzegowe o liniowej zależności dyspersyjnej łączą pasmo walencyjne z pasmem przewodnictwa. Ich punkt przecięcia (tzw. TRIM) znajduje się w punktach wysokiej symetrii, zależnych od warunków brzegowych geometrii typu zygzak i fotelikowej. Mody helikalne są chronione topologicznie i stanowią podstawę zjawiska spinowego kwantowego efektu Halla. Inny scenariusz podobnego zjawiska fizycznego zaproponowali Bernevig, Hughes i Zhang na bazie modelu Qi-Wu-Zhanga. Okazał się on realizowalny w studniach kwantowych HgTe/CdTe, gdzie silne oddziaływanie spinowo-orbitalne otwiera dużą przerwę między pasmami walencyjnym i przewodnictwa. Praca doktorska jest oparta na tego rodzaju formalizmie, który został szczegółowo przedstawiony w rozdziale drugim. Doktorantka podkreśliła, że kramersowska para przeciwbieżnych modów brzegowych jest chroniona topologicznie (tzn. nie ulega wstecznemu rozpraszaniu) dzięki symetrii odwrócenia względem czasu. Pod wpływem czynników zewnętrznych może nastąpić odwrócenie znaku wyrazu masowego powodując zamknięcie i ponowne otworzenie przerwy energetycznej, jednocześnie zmieniając liczbę par kramersowskich pomiędzy parzystą i nieparzystą. Obserwowalną konsekwencją takiego przejścia topologicznego jest skokowa zmiana przewodności różniczkowej, co zilustrowano na rysunku 1.6. Doktorantka zasygnalizowała istotny wpływ pola magnetycznego oraz oddziaływań kulombowskich

na przewodnictwo próbek o różnych rozmiarach, uwzględniając powstawanie ekscytonów (związanej pary elektronu z pasma przewodnictwa i dziury z pasma walencyjnego) oraz ewentualnych kondensatów ekscytonowych.

Dalsza część rozdziału pierwszego porusza problematykę topologicznie nietrywialnej fazy nadprzewodzącej, na brzegach której występują kwazicząstki Majorany podlegające nieabelowej statystyce. Prototypem topologicznego nadprzewodnika jest łańcuch Kitaeva, uwzględniający przeskok fermionów między sąsiednimi węzłami oraz parowanie trypletowe. Parzystość stanu podstawowego tego scenariusza charakteryzuje niezmiennik topologiczny  $Z_2$ . Faza topologiczna realizuje się w przypadku nieparzystym, gdy jeden fermionowy stopień swobody jest efektywnie zamrożony. Doktorantka wskazała niezbędne elementy składowe wymagane do praktycznego uzyskania topologicznego nadprzewodnictwa w strukturach hybrydowych. Tego rodzaju tematyka jest rozwinięta w jednej z publikacji Doktorantki, stanowiącej treść rozdziału piątego. Obliczenia właściwości transportowych przeprowadzono przy pomocy ogólnodostępnego pakietu Kwant. Wyznaczanie natężenia prądu tunelowania pomiędzy zewnętrznymi rezerwuarami cząstek (elektronów) bazuje na formalizmie Landauera-Büttikera. W szczególności nieskotemperaturowe przewodnictwo różniczkowe jest określone poprzez transmitancję układu [wzór (1.28)]. Doktorantka nakreśliła główne cele swoich badań. Jednym z nich było zbadanie wpływu kondensatu ekscytonowego na topologiczne przejście do kwantowego spinowego izolatora Halla bez zamykania przerwy energetycznej. Drugim ważnym zagadnieniem było zbadanie możliwości realizacji topologicznego nadprzewodnictwa dzięki wykorzystaniu ekscytonów jako narzędzia do złamania symetrii odwracalności w czasie zamiast pola magnetycznego i/lub samoorganizujących się struktur magnetycznych. Kolejnym zadaniem było określenie empirycznych sposobów identyfikacji kwazicząstek Majorany.

Rozdział drugi opisuje warunki doświadczalne kwantowego spinowego efektu Halla zrealizowane przy użyciu studni kwantowych  $\text{HdTe}/\text{CdTe}$  oraz  $\text{InAs}/\text{GaSb}$ . W pierwszym z tych przypadków obszar studni kwantowej o odpowiedniej szerokości jest wykonany z  $\text{HgTe}$ , natomiast  $\text{CdTe}$  stanowi barierę potencjału. Inwersja pasm energetycznych zachodzi wokół punktu  $\Gamma$  pod wpływem zmiany szerokości studni kwantowej. Faza topologiczna występuje powyżej krytycznej szerokości  $d_c$ , co ilustruje rysunek 2.1. W drugim przypadku pasmo elektronowe i dziurowe powstają na oddzielnych studniach kwantowych w obszarze  $\text{InAs}$  i  $\text{GaSb}$ . Dodatkowo barierę studni stanowi obszar  $\text{AlSb}$ , do którego przyłożone są potencjały zewnętrznych bramek. Inwersja słabo sprzężonych pasm może być uzyskana zarówno poprzez zmianę szerokości studni jak też za pomocą potencjałów bramkujących (rysunek 2.2). Doktorantka przedstawiła mikroskopowy model adekwatny do opisu obu wariantów studni kwantowych na bazie scenariusza Bernevig-Hughes-Zhanga. Przedyskutowała następnie symetrie hamiltonianu jednocząstkowego i określiła realistyczną wartość parametrów modelu. W kolejnych fragmentach rozprawy przedstawiono konfigurację pasmową studni kwantowej I-ego rodzaju (rysunki 2.3 oraz 2.4) i II-ego rodzaju

(rysunek 2.5) dla trywialnego izolatora, w pobliżu przejścia topologicznego oraz dla fazy spinowego kwantowego izolatora Halla. Doktorantka uwzględniła wpływ asymetrii mas elektronów i dziur. Dla przypadku, gdy spinowe sektory nie są sprzężone ( $\Delta_z = 0$ ) właściwym indeksem topologicznym jest liczba Cherna. Jej wartość w obecnym modelu wynosi zero (dla fazy trywialnej) lub dwa (dla fazy topologicznej). Doktorantka przedyskutowała kwestię indeksu topologicznego dla sytuacji gdy  $\Delta_z \neq 0$ . Niezmiennik topologiczny  $Z_2$  wyznaczony jest wówczas na podstawie liczby punktów zerowej wartości pfaffianu. W praktyce indeks topologiczny  $Z_2$  określa liczbę par helikalnych modów brzegowych. Doktorantka wskazała następnie, że dwa typy studni kwantowych uzyskują odmienne właściwości pod wpływem pola magnetycznego. W obecności pola skierowanego prostopadle do studni kwantowej I-typu układ może przejść do fazy anomalnego zjawiska Halla, natomiast w przypadku studni kwantowej II-typu pojawia się stan kwazi-metaliczny lub kwantowy izolator Halla (zależnie od natężenia pola). Dla pól równoległych do płaszczyzny studni I-rodzaju efekty orbitalne są nieobecne a rozszczepienie Zeemana wnosi niewielki wkład do przerwy energetycznej. Dla studni II-rodzaju istotne znaczenie mają efekty orbitalne, które powodują przesunięcie pasm o pewien wektor  $\pm \vec{k}_M$  co prowadzi do przejścia w stan semimetaliczny przy krytycznym natężeniu pola. Doktorantka uwzględniła też rolę nieporządku dla poszczególnych przypadków.

Rozdział trzeci opisuje mechanizm powstawania ekscytonów w studniach kwantowych II-rodzaju i analizuje niekonwencjonalny scenariusz przejścia topologicznego bez zamykania przerwy energetycznej. Traktując oddziaływania kulombowskie między elektronami i dziurami sąsiednich studni kwantowych na poziomie przybliżenia średniopoleowego zbadano zespolony parametr porządku [wzór (3.1)] z uwzględnieniem singletowej i trypletowej składowej. Mikroskopowa definicja poszczególnych (singletowych/trypletowych) komponentów kondensatu ekscytonowego jest podana w wyrażeniu (3.3). Przykładową zależność rzeczywistych i urojonych części parametrów porządku względem parametru inwersji pasm  $E_G$  zilustrowano na rysunku 3.1. Szczególny przypadek ma miejsce wówczas, gdy części urojone przyjmują niezerową wartość (co ma związek ze spontanicznie złamaną symetrią odwracalności w czasie). W celu identyfikacji topologicznie nietrywialnej fazy zdefiniowano parametr parzystości [wzór (3.6)] o analogicznym znaczeniu do niezmiennika topologicznego  $Z_2$ . Na podstawie przeprowadzonych obliczeń numerycznych uzyskano diagram fazowy we współrzędnych  $A$ ,  $E_G$  konsystentny z kryterium opartym na łamaniu symetrii odwrócenia czasu. Analizując ewolucję widma kwazicząstkowego wzdłuż przejścia od fazy trywialnego izolatora do kwantowego spinowego izolatora Halla stwierdzono, że przejście topologiczne odbywa się bez zamykania przerwy (rysunek 3.4). Występowanie helikalnych modów brzegowych w przerwie energetycznej wynika z minimalizacji energii swobodnej układu. W ostatnim fragmencie rozdziału trzeciego Doktorantka zbadała wpływ sprzężenia  $\Delta_z$  oraz asymetrii mas elektronów i dziur na przejście topologiczne.

Na rozdział czwarty składa się artykuł Doktorantki [Phys. Rev. B **106**, 235420 (2022)] analizujący transportowe właściwości układu omawianego w poprzednim rozdziale. Głównym przedmiotem obliczeń przeprowadzonych na bazie przybliżenia średniego pola dla oddziaływań kulombowskich elektronów/dziur sąsiednich studni kwantowych było określenie specyficznych właściwości fazy złamanej symetrii czasowej (TRS) w porównaniu do trywialnego izolatora i stanu spinowego kwantowego efektu Halla. Pokazano, że ewolucji widma kwazicząstkowego (rysunek 2 w artykule) zaindukowanej zmianą parametru inwersji pasm  $E_G$  towarzyszą jakościowe różnice charakterystyki transportu. Zależność przewodnictwa różniczkowego wykazała tendencję do uniwersalnej wartości  $2e^2/h$ , zarówno przy wzroście temperatury jak napięcia. Autorzy dokonali oszacowania średniej długości swobodnej  $l(E)$  poza tym asymptotycznym obszarem, uzyskując dobrą zgodność z wynikami doświadczalnymi [PRL **115**, 136804 (2015)]. W celu jednoznacznego wyodrębnienia roli modów brzegowych od transportu objętościowego zaproponowano oryginalny sposób oparty na schemacie geometrii Corbino (rysunek 5a). Obliczenia za pomocą pakietu KWANT wykazały, że przewodnictwo objętościowe jest praktycznie wytłumione w zakresie napięcia mniejszego od przerwy, której wartość pozostaje niemal niezmienna względem parametru inwersji pasm  $E_G$ . W odróżnieniu od takiego zachowania, przewodnictwo modów brzegowych skokowo narasta przy przejściu od egzotycznej fazy TRS do fazy topologicznej. W obszarze TRS przerwa energetyczna (obserwowalna w przewodnictwie różniczkowym) ulega stopniowemu zamknięciu, co świadczy o jakościowej przemianie kwazicząstek brzegowych, których propagacja w obszarze TRS jest częściowo tłumiona zaś po przejściu układu do fazy spinowego kwantowego efektu Halla uzyskują one protekcję topologiczną.

Rozdział piąty jest oparty na artykule Doktorantki [Phys. Rev. B **106**, 235421 (2022)], w którym rozpatrzono oryginalny scenariusz realizacji topologicznej fazy nadprzewodzącej bez użycia pola magnetycznego lub innych magnetycznych nanostruktur. Idea tego mechanizmu polega na umieszczeniu egzotycznej fazy TRS (omówionej w rozdziałach 3-4) w kontakcie z konwencjonalnym nadprzewodnikiem. W takich okolicznościach spełnione są niezbędne warunki spontanicznie złamanej symetrii odwrócenia czasu oraz sprzężenie cząstkowo-dziurowych stopni swobody, dzięki nadprzewodzącemu efektowi bliskości. Doktorantka sformułowała efektywny niskoenergetyczny opis teoretyczny kwazicząstek brzegowych w obecności zaindukowanego parowania (szczegółowo objaśniony w dodatku A), na podstawie którego przewidziano pojawienie się modów Majorany na brzegach izolatora TRS. Wyniki zostały potwierdzone za pomocą samozgodnego rozwiązania w formalizmie Bogoliubova de Gennesa dla dwuwymiarowego układu, wyznaczając niezmiennik topologiczny  $Z_2$ . Autorzy określili obszar nietrywialnej fazy nadprzewodzącej względem parametrów  $E_G^S$ ,  $E_G^N$  (przedstawiony w artykule na rysunku 2b). W dalszej części rozpatrzono konfigurację złącza Josephsona, w którym pomiędzy zewnętrznymi nadprzewodnikami wbudowany jest wąski obszar izolatora TRS. W takiej heterostrukturze powstają

dwie pary modów Majorany (rysunek 3), w rezultacie gwarantując periodyczność  $4\pi$  prądu Josephsona względem różnicy faz elektrod nadprzewodzących (szczegółowe obliczenia zestawiono w dodatku B). Ponadto zaproponowano protokół detekcji qubitów topologicznych w oparciu o schemat fuzji modów zerowych. Autorzy podali realistyczne wartości parametrów modelu zapewniających empiryczną obserwowalność fuzji. W dodatku D rozpatrzono także tunelowanie pomiędzy elektrodą nadprzewodzącą i drugą elektrodą w stanie kwantowego spinowego efektu Halla rozdzielonych warstwą TRS. W takich warunkach niskonapięciowy transport ładunku odbywa się poprzez mechanizm Andreeva (konwersję elektronu w dziurę). Przewodnictwo różniczkowe wykazuje wtedy wzmocnienie zerowego napięcia (rysunek 14).

Rozdział 6 podsumowuje główne wyniki przeprowadzonych badań. Mgr Tania Paul podkreśliła szczególne znaczenie fazy ze spontanicznie złamaną symetrią odwrócenia w czasie (TRS), która realizuje się w podwójnej studni kwantowej w zakresie pośredniej wartości oddziaływania kulombowskiego między pasmem elektronowym i dziurowym. Faza ta występuje między trywialnym izolatorom i stanem kwantowego spinowego efektu Halla. Detekcję takiej egzotycznej fazy można przeprowadzić poprzez pomiary transportowe na dysku Corbino, rozdzielając wkład modów objętościowych od kwazicząstek brzegowych. Z mojego punktu widzenia najbardziej oryginalnym osiągnięciem Doktorantki jest propozycja mechanizmu topologicznej fazy nadprzewodzącej poprzez zetknięcie konwencjonalnego nadprzewodnika z obszarem fazy TRS. Zaletą tego pomysłu jest brak konieczności stosowania pola magnetycznego albo innych samoorganizujących się struktur magnetycznych, które zwykle mają destrukcyjny wpływ na stan nadprzewodzący (niszcząc pary elektronowe). Na bazie propozycji uzyskano szereg cennych wyników, zarówno dla dwukomponentowej heterostruktury jak też w konfiguracji złącz Josephsona oraz Andreeva.

Rozprawa doktorska pani magister T. Paul wnosi istotny wkład w zrozumienie subtelnej natury faz topologicznych zaindukowanych oddziaływaniami w układach studni kwantowych. Doktorantka przeprowadziła systematyczną analizę realizowalności różnych typów kwantowego efektu Halla (całkowitego, anomalnego i spinowego). Szczegółowo zbadała widmo kwazicząstkowe i właściwości transportu ładunkowego dla egzotycznej fazy izolatorowej ze spontanicznie złamaną symetrią odwrócenia w czasie. Zaproponowała oryginalny scenariusz realizacji nietrywialnego topologicznie nadprzewodnika bez konieczności używania uporządkowań lub pól magnetycznych. Wykazała obecność kwazicząstek Majorany na interfejsie fazy TRS i konwencjonalnego nadprzewodnika oraz wyznaczyła unikalne właściwości transportowe heterostruktur typu Josephsona i Andreeva. Dysertacja została przygotowana bardzo starannie w języku angielskim (zauważyłem jedynie dość nieliczne potknięcia edytorskie o zupełnie nieistotnym znaczeniu dla rozumienia treści pracy). Przedłożona rozprawa spełnia zwyczajowe oraz prawne wymagania określone w Ustawie *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późniejszymi zmia-

nami) do nadania stopnia doktora w dyscyplinie *nauki fizyczne*. Wnioskuje więc do Rady Naukowej Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie o dopuszczenie pani magister T. Paul do publicznej obrony oraz dalszych etapów Jej przewodu doktorskiego.

Jacek Domainski