

prof. dr hab. inż. Bartłomiej Szafran
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków

Kraków 15.07.2020

Recenzja pracy doktorskiej
Pana mgr inż. Szczepana Głodzika p.t.

Influence of spin-orbit interactions on bound states in superconductors

Rozprawa mgr inż. Szczepana Głodzika, wykonana pod opieką prof. dr hab. Tadeusza Domańskiego na Wydziale Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej, dotyczy stanów pojawiających się w przerwie energetycznej dwuwymiarowego nadprzewodnika pod wpływem zewnętrznych zaburzeń oraz wpływu oddziaływania spin-orbita na stany związane, w tym na ich strukturę topologiczną. Część pracy przedstawionej do recenzji doktorant wykonał na stażu w *Computational Physics Laboratory* w Tampere pod opieką prof. Teemu Ojanena. Badania doktorskie były częściowo finansowane z grantu Preludium NCN, którego kierownikiem był autor rozprawy.

Przedstawiona do recenzji rozprawa przygotowana w języku angielskim, zawiera trzy rozdziały wprowadzające (wstęp, podstawy teoretyczne, stosowane metody) oraz opis wkładu doktoranta do czterech publikacji i dwóch manuskryptów, które zostały włączone do rozprawy.

Pierwszy rozdział stanowi wstęp, w którym zagadnienia poruszane w rozprawie autor umieszcza w szerokim kontekście badań nad nadprzewodnictwem oraz zagadnieniami topologii stanów elektronowych. W rozdziale drugim doktorant opisuje hamiltonian BCS, jego diagonalizację po transformacji Bogoliubowa-Valatin'a w bazie stanów kwazicząstek o składowych elektronowych i dziurowych. Następnie autor wprowadza stany Shiby (Yu-Shiby-Rusinowa, YSR) związane na domieszkach magnetycznych z energiami w przerwie energetycznej. Autor omawia przejście fazowe zachodzące przy krytycznej wartości stałej sprzężenia, powyżej której związany stan podstawowy posiada niesparowany spin i traci naturę BCS. Sekcja druga rozdziału, poświęcona zagadnieniom topologicznym ma duży walor dydaktyczny. Doktorant wprowadza fazę, połączenie (*connection*) oraz krzywiznę Berryego oraz liczbę Cherna, przy czym doktorant podaje związki między nimi powołując się na intuicje czytelnika z zakresu elektromagnetyzmu. Doktorant podaje jako przykład izolatora topologicznego grafen z oddziaływaniem spin-orbita typu Kane-Mele oraz opisuje

chronione topologicznie stany w przerwie energetycznej, otwartej przez oddziaływanie spinowo-orbitalne, które lokalizowane są przy krawędzi kryształu. Na tej podstawie autor buduje pojęcie nadprzewodnictwa topologicznego ze stanami w przerwie zlokalizowanymi na krawędziach obszaru nadprzewodzącego. Autor wyjaśnia, że nietrywialnie topologiczne stany o zerowej energii odpowiadają kwazicząstkom Majorany, których opis zajmuje dużą część oryginalnych prac doktoranta.

Rozdział trzeci zawiera krótki opis metodologii wykorzystanej w pracy doktorskiej. Autor rozwiązuje równania Bogoliubowa-de Gennes'a w wersji ciasnego wiązania. Hamiltonian jest poddawany transformacji Bogoliubowa – Valatin'a, w którym operatory kreacji i anihilacji odpowiadają liniowym kombinacjom stanów elektronowych i dziurowych. Wyjściowy Hamiltonian zawiera parametr porządku, który w rachunku jest wyznaczany przez samouzgodnienie. Po rozwiązaniu równań autor wyznacza lokalną gęstość stanów, prądy płynące między węzłami siatki ciasnego wiązania oraz polaryzację stanów związanych do rozstrzygnięcia ich natury topologicznej: trywialnej lub nietrywialnej (Majorany).

Treści w części wprowadzającej podawane są klarownie, dobrym angielskim. Perspektywa, w której autor sytuuje swoje badania doktorskie jest szeroka.

Rozdział czwarty zawiera opis wkładu autora do prac tworzących rozprawę. Wkład doktoranta polega zazwyczaj na przeprowadzeniu rachunków analitycznych i numerycznych oraz udziale w przygotowaniu manuskryptu. Deklaracje doktoranta są spójne z oświadczeniami pozostałych autorów prac.

Pierwsza praca cyklu A. Ptok, S. Głodzik, i Tadeusz Domański, *Physical Review B* 96, 184425 (2017) *Yu-Shiba-Rusinov states of impurities in a triangular lattice of NbSe₂ with spin-orbit coupling* inspirowana jest pracą Menarda i innych [*Nat. Phys.* **11**, 1013 (2015)], która wskazała, że stany Shiby związane na domieszkach magnetycznych w układach dwuwymiarowych są znacznie słabiej zlokalizowane niż w nadprzewodnikach litych, oraz zebrała dane doświadczalne (STM) na temat zasięgu, gwiaździstej struktury przestrzennej oraz oscylującej asymetrii elektron-dziura w części radialnej stanów zlokalizowanych na domieszkach magnetycznych. Publikacja z cyklu doktorskiego wykorzystuje Hamiltonian BdG w wersji ciasnego wiązania na sieci trójkątnej z klasyczną domieszką magnetyczną opisaną punktowym przyczynkiem do operatora energii. Hamiltonian w pracy w *Physical Review B* poszerza dyskusję z pracy w *Nature Physics* o oddziaływanie spin-orbita z dowolnie wybraną osią polaryzacji spinów. Praca zawiera dyskusję przejścia fazowego związanego z przecięciem poziomów energetycznych stanów spolaryzowanych i niespolaryzowanych w funkcji parametru sprzężenia magnetycznego domieszki oraz wpływu parametru oddziaływania spin-orbita na wartość parametru krytycznego dla przejścia i na lokalny parametr porządku. Oddziaływanie spin-orbita ma wpływ na rozkład przestrzenny stanów zlokalizowanych i zwiększa zasięg lokalizacji. Praca bada również stany rozciągle przy układach dwóch nieodległych domieszek magnetycznych

ze wskazaniem sztucznego sprzężenia walencyjnego oraz stanów wiążących i antywiązących, które powstają o ile domieszki znajdują się w odległości mniejszej od zasięgu lokalizacji stanów Shiby. W dalszych pracach cyklu oddziaływanie spin-orbita jest badane głębiej, jako czynnik, który wraz z rozszczepieniem Zeemana prowadzi do pojawienia się topologicznej fazy nadprzewodzącej oraz stanów Majorany. W drugiej pracy: S. Głodzik i inni, *Interplay between pairing and correlations in spin-polarized bound states* z Beilstein Journal of Technology, doktorant deklaruje udział w obliczeniach do sekcji pt. *Single magnetic impurity*. Zawartość tej sekcji jest podobna do materiału z pierwszej pracy cyklu, z tym, że artykuł wykorzystuje siatkę kwadratową zamiast trójkątnej, co zmienia symetrię profili przestrzennych stanów Shiby.

W pracy trzeciej S. Głodzik i T. Domański, z *Journal of Physics Condensed Matter*, *In-gap states of magnetic impurity in quantum spin Hall insulator proximitized to a superconductor* zmieniony jest ośrodek, w którym badane są stany elektronowe. Rozważany jest układ odpowiadający grafenowi ze sprzężeniem spin-orbita typu Kane-Mele. Sprzężenie to otwiera przerwę topologiczną w strukturze pasmowej. Autor dodaje również sprzężeniem spin-orbita typu Rashby, które pojawia się wraz ze złamaniem symetrii zwierciadlanej układu. Obniżenie symetrii wprowadza w szczególności nadprzewodnik, który doprowadzany jest do zbliżenia z grafenem. W układzie obecne są domieszki magnetyczne, które wiążą stany elektronowe. Pod nieobecność nadprzewodnika domieszka wiąże parę stanów w topologicznej przerwie energetycznej. Dodanie do układu efektu bliskości nadprzewodnika wprowadza dodatkową parę stanów Shiby, których energie przecinają się powyżej krytycznej wartości parametru sprzężenia magnetycznego domieszki. Oddziaływanie spin-orbita zwiększa wartość parametru krytycznego, podobnie jak w stanach związanych w nadprzewodniku, które były przedmiotem pierwszej pracy cyklu. Autor wskazuje, że można odróżnić stany Shiby od pozostałych stanów w przerwie obserwując ich zależność od stałej sprzężenia magnetycznego J . Przy dużym oddziaływaniu spin-orbita zależność wszystkich stanów od J jest duża, ale tylko jedna para poziomów energetycznych ulega przecięciu powyżej sprzężenia krytycznego. Autorzy pracy wskazują również, iż przy przejściu fazowym, poza polaryzacją, która spada do zera, gdy stan niespolaryzowany staje się stanem podstawowym, nieciągły jest również parametr porządku na domieszce, mimo że parametr porządku dla całej próbki pozostaje ciągły. Lokalna gęstość stanów dla kwazicząstki Shiby wykazuje asymetrię elektron-dziura oraz trzykrotną oś symetrii.

Praca czwarta S. Głodzik i T. Ojanen, *Engineering nodal topological phases in Ising superconductors by magnetic superstructures* z New Journal of Physics, przedstawia modelowanie dwuwymiarowej struktury van der Waalsa w postaci NbSe_2 dichalkogenku metalu przejściowego (TMDC), który jest nadprzewodnikiem Isinga. Struktura pasmowa dla nieskończonej jednorodnej wstęgi o krawędzi zигzag zawiera punkty, w których pasmo

przewodnictwa styka się lub przecina się z pasmem walencyjnym. Szczególnie interesujące są te wektory falowe, w których pojawia się dwukrotnie zdegenerowane płaskie pasmo o zerowej energii. Odpowiednie stany zlokalizowane są w okolicach krawędzi wstęgi i odpowiada im nietrywialny (niezerowy) topologiczny indeks *winding number* o wartości minus 2, które odpowiadają pasmom Majorany. Następnie autorzy rozważają układ nieskończony, tj. pozbawiony krawędzi, z nałożoną łąką ferromagnetyczną z magnetyzacją zorientowaną w płaszczyźnie, w kierunku y . Autorzy znajdują stany o zerowej energii zlokalizowane przy krawędziach nadprzewodnika prostopadłych do osi x . Nieobecność zlokalizowanych stanów topologicznych równoległych do osi x jest tłumaczona przez lokalizację punktów węzłowych w ramach strefy Brillouina [Fig. 4], oraz znoszenie się węzłów o przeciwnych znakach przy rzutowaniu na oś k_x . Dyskusja jest ciekawa. Brakuje mi jednak wyliczenia indeksu topologicznego dla zlokalizowanych stanów, dla których wartość wektora falowego nie jest ściśle określona. Czy to wyliczenie dla stanów zlokalizowanych jest trudniejsze technicznie?

Praca piąta to manuskrypt artykułu, w którym podjęta została próba obserwacji efektów opisanych w artykule z *New Journal of Physics*. Manuskrypt pt *Topological superconductivity in a designer ferromagnet-superconductor van der Waals heterostructure* (Kezilebieke i inni) opisuje produkcję struktur zaprojektowanych w pracy czwartej z ferromagnetycznymi wyspami z CrBr_3 na dwuwymiarowej nadprzewodzącej warstwie NbSe_2 oraz o pomiarach spektroskopowych struktury elektronowej z rozdzielczością przestrzenną wykorzystującą mikroskop sił atomowych. Badania przedstawione w pracy wskazują na obecność stanów zlokalizowanych na krawędzi ferromagnetyka w środku nadprzewodzącej przerwy energetycznej. Stany mogą odpowiadać kwazicząstkom Majorany, lub – co również możliwe – trywialnym stanom krawędziowym. Argumentem za topologicznym charakterem zlokalizowanych stanów jest zanik pików przewodności w środku przerwy w silnym polu magnetycznym, które lokalnie znosi nadprzewodnictwo. Praca dokumentuje udział autora rozprawy w dużym przedsięwzięciu naukowym o dużym znaczeniu zarówno technologicznym jak i poznawczym. Rolą doktoranta było przeprowadzenie obliczeń oraz udział w interpretacji wyników. Część wyników oraz opis teorii znajduje się w materiale uzupełniającym, którego nie dołączono do rozprawy, a szkoda. Ogólnie w przedstawionej dokumentacji brakuje mi szczegółów rachunków numerycznych prowadzonych przez autora rozprawy. Czy doktorant mógłby skomentować ewentualne badania doświadczalne nad zależnością uwięzienia stanów przy krawędzi nadprzewodnika a jej orientacją, w świetle rozważań prowadzonych wcześniej w artykule z *New J. Phys.*?

Ostatni dokument włączony do cyklu to manuskrypt pt *How to measure a Majorana: The Majorana polarization of a topological planar Josephson junction* (autorzy: Szczepan Głodzik, Nicholas Sedlmayr i Tadeusz Domański). Praca bada możliwość wykrycia stanów Majorany wewnątrz metalu tworzącego barierę tunelową złącza Josephsona z wykorzystaniem mikroskopu sił atomowych z magnetycznym ostrzem. Modelowanie oparte jest o Hamiltonian z jednorodnym przestrzennie oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby,

spinowym czynnikiem Zeemana dla pola magnetycznego zorientowanego równolegle do złącza Josphehsona, oraz niejednorodnym przestrzennie czynnikiem parowania opisującym złącze z niezerową wartością sprzężenia w obszarze nadprzewodzącym. Nadprzewodniki po obydwu stronach złącza są ustawione w antyfazie, co ma sprzyjać powstawaniu nadprzewodzących stanów topologicznych. Do charakteryzacji stanów wykorzystywana jest wielkość nazywana uogólnioną polaryzacją stanów, wprowadzona przez jednego z autorów pracy [N. Seldmayr, PRB 92, 115115 (2015), PRB 93, 155425 (2016)]. Wielkość wykorzystuje operator elektron-dziura, którego wartość oczekiwana przyjmuje wartość 1 dla stanów Majorany oraz 0 dla stanów trywialnych topologicznie. Polaryzacja używana w manuskrypcie jest lokalną wielkością wektorową o określonych składowych spinowych uzyskaną po wyrzutowaniu operatora elektron-dziura na położenie. Niezerowa wartość polaryzacji wskazuje na przekrywanie się funkcji falowych elektronu i dziury, charakterystyczne dla stanów Majorany. Praca prezentuje profile przestrzenne lokalnej gęstości stanów o zerowej energii w zależności od grubości warstwy metalicznej w złączu. Stany Majorany występują niezależnie od tej szerokości na krawędziach metalu tworzącego złącze, przy czym dla szerszej bariery metalicznej penetracja stanów Majorany do jej wnętrza rośnie. Po scharakteryzowaniu stanów topologicznych autorzy modelują sprzężenie z ostrzem mikroskopu, a w szczególności spektroskopię Andrejewa wykorzystującą konwersję elektronu z ostrza mikroskopu, który przechodzi do obszaru nadprzewodzącego, na parę Coopera i dziurę odbitą w kierunku ostrza. Autorzy pokazują, w ramach teorii Landauera, że przewodność różniczkowa dla prądu płynącego między próbką a ostrzem jest proporcjonalna do zszytyzowanej polaryzacji Majorany, co pozwala sądzić, że pomiar prądu dla magnetycznego ostrza pozwoli nie tylko wykryć gęstość stanów o zerowej energii, ale również ich polaryzację, a więc pośrednio wskazać ich nietrywialnie topologiczny charakter. Na ile przyjęcie jednorodnej stałej sprzężenia dla obszaru nadprzewodzącego i metalicznego jest dobrym przybliżeniem, czy jego ewentualna niejednorodność wynikająca np. z pola elektrycznego wprowadzonego przez ostrze mikroskopu może mieć znaczenie dla wielkości omawianych w tej pracy?

Podsumowując, do oceny przedstawiono cykl prac dotyczących stanów zlokalizowanych przez magnetyczne domieszki / zaburzenia wprowadzone do dwuwymiarowego ośrodka nadprzewodzącego. Badania dotyczą bardzo aktualnej tematyki nadprzewodnictwa dwuwymiarowego, stanów Majorany, inżynierii układów Van der Waalsa. Doktorant od pierwszej do ostatniej pracy rozwija teorię opartą na Hamiltonianie BdG z oddziaływaniem spin-orbita oraz bada topologiczną naturę uwięzionych stanów. Cykl jest bardzo zwarty. Ramy teoretyczne i metodologia określone są już w pierwszych pracach. Następne prace dokumentują rozwój doktoranta jako badacza. Od standardowej teorii wnoszącej przyczynę do wcześniejszych ustaleń, autor w ramach doktoratu dochodzi do uczestnictwa w planowaniu, realizacji i interpretacji eksperymentów, czyli pokonuje modelową ścieżkę pozwalającą na odniesienie znaczącego sukcesu w pracy fizyka teoretyka. Doktorant wnosi znaczący wkład do prac badawczych prowadzonych do współpracy, w tym z

eksperymentatorami, a sam doktorat poszerza istotnie wiedzę w zakresie zlokalizowanych stanów topologicznych w nadprzewodnikach.

Z pełnym przekonaniem mogę stwierdzić, że materiał przedstawiony do oceny spełnia z naddatkiem zwyczajowe i prawne warunki dla uzyskania stopnia doktora w dyscyplinie „nauki fizyczne”. Wnoszę o dopuszczenie mgr Szczepana Głodzika do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Bez wątpienia przedstawiona do recenzji praca zasługuje na wyróżnienie.

Bartłomiej Sreter