



Prof. dr hab. Maciej Maśka
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Podstawowych Problemów Fizyki
Politechnika Wrocławska

Wrocław, 30.07.2026

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr. Waseema Akbara p.t.:
**„Unconventional superconductivity, topology and strong
electronic correlations in two dimensional transition-metal
dichalcogenide moiré bilayers”**

Rozprawa doktorska „*Unconventional superconductivity, topology and strong electronic correlations in two dimensional transition-metal dichalcogenide moiré bilayers*” autorstwa Waseema Akbara poświęcona jest teoretycznemu opisowi niekonwencjonalnego nadprzewodnictwa w silnie skorelowanych układach moiré tworzonych przez dichalkogenki metali przejściowych. Podjęta problematyka jest aktualna i ważna, zarówno z punktu widzenia fizyki układów silnie skorelowanych, jak i rozwijających się możliwości kontrolowania faz kwantowych w materiałach dwuwymiarowych.

Praca ma formę spójnego tematycznie cyklu czterech publikacji, poprzedzonego obszernym wprowadzeniem przedstawiającym kontekst eksperymentalny, stosowane modele efektywne oraz metodę Gutzwillera. Wprowadzenie to nie stanowi części osiągnięcia, niemniej jednak chciałbym zacząć od uwag na jego temat, gdyż część z nich w sposób naturalny odnosi się także do ocenianych publikacji. Dotyczy to zwłaszcza formalizmu używanego w pracach.

1. Ocena części wstępnej rozprawy

Część wstępna rozprawy wprowadza w aktualny i ważny problem nadprzewodnictwa oraz stanów skorelowanych w dwuwymiarowych strukturach moiré opartych na dichalkogenkach metali przejściowych. Jej mocną stroną jest próba przedstawienia czterech publikacji jako elementów jednego programu badawczego, obejmującego przejście od silnie skorelowanego modelu t - J , przez model t - J - U dopuszczający skończone prawdopodobieństwo podwójnej obsady, po modele uwzględniające dalsze całki przeskoku i oddziaływania międzysieciowe. Taka konstrukcja pozwala dyskutować w jednym języku zarówno homodwuwarstwy $tWSe_2$, jak i heterodwuwarstwy WS_2/WSe_2 , a zarazem analizować wpływ obsadzenia, pola prostopadłego do warstw, siły korelacji oraz oddziaływań dalekiego zasięgu.

Za szczególnie wartościowe uważam powiązanie efektywnego opisu wielociałowego z właściwościami struktury pasmowej charakterystycznymi dla materiałów TMD. Spinowo i kierunkowo zależne zespolone całki przeskoku opisują sprzężenie spin-orbita oraz blokowanie spin-dolina. Dzięki temu mieszanie parowania singletowego ($d + id$) i trypletowego ($p - ip$) nie jest wprowadzane wyłącznie jako arbitralny ansatz, lecz wynika z obniżenia symetrii i rozszczepienia powierzchni Fermiego. Podejście prowadzi też do konkretnych, potencjalnie falsyfikowalnych przewidywań: topologicznych faz nadprzewodzących o lic-



Politechnika Wrocławska

Instytut Fizyki Teoretycznej

bach Cherna $C = \pm 2, \pm 4$, przejść topologicznych indukowanych zmianą obsadzenia i pola prostopadłego oraz możliwości regulowania względnego udziału składowych singletowej i trypletowej. Są to przewidywania znacznie bardziej szczegółowe niż samo stwierdzenie możliwości wystąpienia nadprzewodnictwa.

Na korzyść rozprawy przemawia również późniejszy rozwój eksperymentalny. Pierwsze wyniki Wanga i współpracowników z 2020 r. wskazywały jedynie na skorelowany izolator i obszary zerowej rezystancji sugerujące możliwe nadprzewodnictwo. Jednoznaczne obserwacje fazy nadprzewodzącej w tWSe_2 pojawiły się dopiero po wykonaniu znacznej części przedstawionych badań teoretycznych. Eksperymenty potwierdziły, że nadprzewodnictwo występuje w ograniczonym obszarze obsadzenia i pola, w pobliżu połówkowego wypełnienia oraz granicy zaniku skorelowanego izolatora. Najnowsze wyniki pokazują ponadto antyferromagnetyczny izolator przy jednym nośniku na komórkę moiré oraz kopuły nadprzewodzące po obu jego stronach. Jest to jakościowo zgodne z centralnym obrazem proponowanym w rozprawie, w którym nadprzewodnictwo jest związane z korelacjami i domieszkowaniem stanu Motta, a nie wyłącznie z dużą gęstością stanów w pobliżu osobliwości van Hove'a. Szczególnie użyteczne jest zestawienie modelu t - J - U z modelem Hubbarda o ujemnym U : pozwala ono wskazać różnicę pomiędzy konwencjonalnym parowaniem podążającym za gęstością stanów a mechanizmem korelacyjnym lokalizującym nadprzewodnictwo w pobliżu połówkowego obsadzenia.

Zgodność z doświadczeniem należy jednak określać jako jakościową. Dwie struktury kopułowe były już sugerowane przez dane z 2020 r., a więc ich odtworzenie nie stanowi całkowicie niezależnego przewidywania. Co ważniejsze, eksperymenty nie potwierdziły dotychczas ani mieszanej symetrii $d + id/p - ip$, ani łamania symetrii odwrócenia czasu, ani przypisanych fazom liczb Cherna. Te elementy pozostają interesującymi przewidywaniami wymagającymi weryfikacji, na przykład za pomocą pomiarów przesunięcia Knighta, efektu Kerra, odpowiedzi termicznego Halla lub poszukiwania chiralnych stanów brzegowych. Wstęp powinien wyraźniej oddzielać cechy już zgodne z danymi - położenie nadprzewodnictwa w pobliżu stanu skorelowanego i jego przestrajalność - od niepotwierdzonej interpretacji symetrii i topologii stanu nadprzewodzącego.

Pomimo niewątpliwych zalet koncepcyjnych część wstępna zawiera szereg problemów merytorycznych. Niepoprawnie przypisano Bednorzowi i Müllerowi uzyskanie temperatury przejścia powyżej temperatury ciekłego azotu, a stwierdzenie, że nadprzewodnictwa niekonwencjonalnego nie można opisać w ramach formalizmu BCS, jest zbyt kateryczne. Należy rozróżnić oryginalny fononowy, izotropowy mechanizm BCS od uogólnionego formalizmu BCS/BdG. Również przedstawienie Sr_2RuO_4 jako ustalonego nadprzewodnika spinowo-trypletowego nie odpowiada obecnemu stanowi wiedzy. W części eksperymentalnej brak odpowiedzi ferromagnetycznej w pracy z 2020 r. został potraktowany jako dowód antyferromagnetyzmu, podczas gdy taki wniosek wymaga dodatkowych pomiarów. Późniejsze doświadczenia rzeczywiście wspierają interpretację antyferromagnetyczną, lecz nie uzasadnia to przypisywania jej wcześniejszej pracy. Niektóre cytowania dotyczące MoTe_2 także nie odpowiadają twierdzeniom w tekście.



CESAER

The strong and united voice of universities
of science and technology in Europe



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wrocławska

Wydział Podstawowych Problemów
Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Poważniejszych wyjaśnień wymaga konstrukcja modelu t - J - U . Jeżeli parametr J w równaniu (3.8) jest wymianą kinetyczną $J_{ij} = 4|t_{ij}|^2/U$ generowaną przez te same wirtualne podwójne obsady, które opisuje jawnie zachowany człon Hubbarda U , pojawia się możliwość podwójnego liczenia tych samych procesów. Jeżeli natomiast J jest niezależnym, fenomenologicznym sprzężeniem efektywnym, należy podać jego mikroskopowe pochodzenie i sposób wyznaczenia. Czynniki fazowe $e^{\pm 2i\phi_{ij}}$ w poprzecznej części wymiany może być uzasadnione: dla spinowo zależnych zespolonych całek przeskoku prowadzi on do anizotropowej wymiany i członu Dzyaloshinskii–Moriya. Właśnie dlatego jego obecność wzmacnia jednak potrzebę wyjaśnienia, czy J wyprowadzono z tych samych całek przeskoku i tego samego U . Ponadto, jeśli $|t|$ zależy od pola, to wyprowadzona z niego wymiana J również powinna na ogół zależeć od pola. Nie wyjaśniono także pominięcia członu $-Jn_i n_j/4$, obecnego we wcześniejszej definicji modelu t - J (3.2).

Nieprecyzyjnie wprowadzono wielkość D . Jest ona nazwana „displacement field”, ale nie zdefiniowano jej związku z napięciami bramek, różnicą potencjałów między warstwami ani konwencją znaku. Stosowanie zamiennie oznaczeń D i E , przy jednostkach V/nm, dodatkowo zaciera różnicę między polem elektrycznym a polem przesunięcia elektrycznego. Ponieważ D jest jednym z podstawowych parametrów diagramów fazowych i wpływa na moduł oraz fazę całek przeskoku, definicja ta powinna pojawić się przed pierwszym użyciem w części teoretycznej.

W rozdziale *Models and Methods* występuje ponadto wiele błędów lub niejasności w równaniach. Przykładowo warunek hermitowskości powinien mieć postać $t_{ij\sigma} = t_{ji\sigma}^*$; w równaniu (3.8) lokalny człon Hubbarda zawiera niespójny indeks j ; w równaniu (3.10) na $V(\mathbf{r})$ jest niepotrzebny czynnik g_j ; w równaniach dotyczących projekcji Gutzwillera występują niespójne potęgi i indeksy (wzór na λ_s^2); zapis hamiltonianu BdG (3.26) może prowadzić do podwójnego zliczania stopni swobody. Fig. 3.2 pokazuje od lewej do prawej reżimy silnych, pośrednich i słabych korelacji, podczas gdy podpis sugeruje kolejność przeciwną. Nawet jeśli część tych usterek ma charakter typograficzny, ich nagromadzenie w równaniach definiujących model utrudnia jednoznaczne odtworzenie metody.

Zakres stosowalności modelu jednopasmowego wymaga dokładniejszej dyskusji, zwłaszcza w reżimach, w których pojedyncze pasma mają nietrywialne dolinowe liczby Cherna. Należy oddzielić topologię pasm normalnych od topologii i hamiltonianu BdG oraz przedstawić procedurę wyznaczania niezmiennika topologicznego. Nieco zbyt skrótowy jest też opis obliczeń numerycznych: brakuje rozmiaru siatki pędowej, kryteriów zbieżności, sposobu wyboru rozwiązań początkowych i metastabilnych oraz informacji o porównywaniu energii konkurencyjnych faz. Przyjęcie jednorodnego, niemagnetycznego stanu powinno być jasno wskazane jako ograniczenie, szczególnie gdy wyniki porównywane są z eksperymentalnym antyferromagnetyzmem i rekonstrukcjami powierzchni Fermiego.

Podsumowując, część wstępna spełnia istotną funkcję integrującą i przedstawia wartościowy, spójny fizycznie program badawczy. Do jej najmocniejszych elementów należą materiałowo motywowany model zespolonych całek przeskoku, powiązanie korelacji z blokowaniem spin-dolina, przewidywanie mieszanej i topologicznej fazy nadprzewodzącej



oraz jakościowe odtworzenie ewolucji od jednej do dwóch kopuł nadprzewodzących w zależności od siły korelacji. Późniejsze doświadczenia istotnie zwiększyły znaczenie tych wyników, potwierdzając bliski związek nadprzewodnictwa z przejściem Motta i stanem antyferromagnetycznym. Jednocześnie wstęp wymaga pewnej korekty równań, definicji parametrów, zakresu stosowalności modeli i stopnia, w jakim wyniki eksperymentalne potwierdzają konkretne przewidywania. Problemy te powinny zostać wyjaśnione, aby argumentacja rozprawy była precyzyjna i w pełni przekonująca.

2. Ocena publikacji „*Topological superconductivity with mixed singlet-triplet pairing in moiré transition metal dichalcogenide bilayers*”

Pierwsza z publikacji wchodzących w skład rozprawy, opublikowana w czasopiśmie *Phys. Rev. B*, dotyczy możliwości wystąpienia topologicznego nadprzewodnictwa w skręconej dwuwarstwie WSe_2 . Autorzy rozważają efektywny jednopasmowy model t - J na sieci trójkątnej, w którym całki przeskoku są zespolone, zależne od spinu i kierunku wiązania oraz przestrajalne za pomocą zewnętrznego pola prostopadłego do warstw. Oddziaływania elektronowe traktowane są wariacyjnie z użyciem projekcji Gutzwillera. Głównym wynikiem pracy jest przewidywanie mieszanego stanu nadprzewodzącego o składowych $d + id$ w kanale singletowym oraz $p - ip$ w kanale trypletowym. Stan ten łamie symetrię odwrócenia czasu i - w zależności od obsadzenia oraz pola - charakteryzuje się liczbami Cherna $C = \pm 2$ lub $C = \pm 4$.

Do najważniejszych zalet pracy należy materiałowo motywowana konstrukcja modelu. Zespolone całki przeskoku nie zostały wprowadzone wyłącznie jako formalny element modelu, lecz odzwierciedlają blokowanie spin-dolina i silne sprzężenie spin-orbita właściwe dla WSe_2 . Ich zależność od pola prostopadłego do warstw pozwala bezpośrednio powiązać parametr kontrolowany eksperymentalnie z rozszczepieniem powierzchni Fermiego, położeniem osobliwości van Hove'a oraz właściwościami stanu nadprzewodzącego. Mieszanie składowych singletowej i trypletowej nie jest przy tym narzucone z góry. Autorzy wyznaczają samouzgodnione amplitudy parowania na wiązkach, a następnie rozkładają je na kanały symetrii. Pokazują również, że po usunięciu spinowo zależnych faz całek przeskoku pozostaje czysty stan singletowy $d + id$. Stanowi to przekonujący argument, że pojawienie się składowej $p - ip$ jest konsekwencją spinowo-dolinowej struktury pasma i obniżenia symetrii z C_6 do C_3 .

Szczególnie wartościowa jest rozbudowana analiza topologiczna. Autorzy nie ograniczają się do stwierdzenia, że chiralna symetria szczeliny powinna prowadzić do stanu topologicznego, lecz obliczają liczby Cherna i przedstawiają diagram topologiczny w płaszczyźnie obsadzenia i pola. Zmiany liczby Cherna są interpretowane za pomocą przejść Lifshitz, zmian kształtu powierzchni Fermiego oraz ruchu zer parametru porządku obdarzonych ładunkami topologicznymi. Praca prowadzi dzięki temu do konkretnych przewidywań: możliwość sterowania względną wielkością składowych singletowej i trypletowej oraz indukowania przejść między fazami o różnych liczbach Cherna za pomocą parametrów dostępnych eksperymentalnie. Wskazano również możliwe metody detekcji, obejmujące pomiary przesunięcia Knighta, efektu Kerra i poszukiwanie chiralnych stanów



CESAER

The strong and united voice of universities
of science and technology in Europe



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wrocławska
Wydział Podstawowych Problemów
Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



brzegowych. Dodatkową zaletą jest udostępnienie kodu i danych użytych do przygotowania rysunków.

Znaczenie pracy wzmacnia jej chronologia. Została ona wykonana, gdy istniały jedynie eksperymentalne przesłanki możliwego nadprzewodnictwa w tWSe_2 . Późniejsze doświadczenia jednoznacznie wykazały istnienie fazy nadprzewodzącej oraz jej bliskość do stanów skorelowanych i magnetycznych. Nie można jednak uznać, że potwierdzono w ten sposób najważniejsze szczegółowe przewidywania artykułu. Symetria $d + id/p - ip$, złamanie symetrii odwrócenia czasu i wartości liczb Cherna pozostają dotychczas przewidywaniami teoretycznymi. Ponadto dwie kopuły nadprzewodzące były już sugerowane przez dane z 2020 r., zatem ich odtworzenie jest raczej jakościowym wyjaśnieniem obserwowanego diagramu niż całkowicie niezależną predykcją.

Podstawowym ograniczeniem pracy jest zastosowanie ściśle rzutowanego modelu t - J w reżimie, w którym oszacowane U jest porównywalne z szerokością pasma. Przy pełnej projekcji ruchliwość i parowanie znikają przy połówkowym obsadzeniu, dlatego powstanie izolatora i rozdzielenie obszaru nadprzewodzącego na dwie kopuły są częściowo wbudowane w konstrukcję modelu. Dodatek poświęcony modelowi t - J - U częściowo łagodzi tę wątpliwość, pokazując ewolucję od jednej do dwóch kopuł przy zwiększaniu U . Nie wyjaśnia jednak w pełni wzajemnej zależności parametrów J , t i U . W głównej części używana jest relacja $J = 4|t|^2/U$, podczas gdy przy zmianie pola, a w dodatku także przy zmianie U , parametr J pozostaje stały. Jeżeli J ma być wymianą kinetyczną pochodzącą z tych samych całek przeskoku i tego samego oddziaływania Hubbarda, takie postępowanie wymaga dodatkowego uzasadnienia.

Istotnym ograniczeniem metody jest zawężenie przestrzeni wariacyjnej do stanów jednorodnych, bez uporządkowania magnetycznego i ładunkowego. Autorzy zaznaczają, że w rozważanym układzie mogą występować stany ferromagnetyczne, antyferromagnetyczne o strukturze 120° oraz inne fazy łamiące symetrię, lecz nie porównują ich energii z energią fazy nadprzewodzącej. W świetle późniejszych wyników wskazujących na bliskość nadprzewodnictwa i uporządkowania antyferromagnetycznego jest to dość istotne ograniczenie. Uzyskany stan należałoby zatem określać jako stan podstawowy w obrębie przyjętej klasy funkcji wariacyjnych, a nie bezwarunkowo jako stan podstawowy pełnego modelu.

Dalszych badań wymaga również odporność wyników topologicznych na rozszerzenie modelu o dalsze całki przeskoku, dodatkowe pasma i możliwą topologię pasma normalnego. Położenie granic między obszarami o różnych liczbach Cherna zależy od relacji pomiędzy powierzchnią Fermiego i zerami przerwy, przez co może być wrażliwe na niewielkie modyfikacje dyspersji. Warto byłoby także wyjaśnić fizyczne znaczenie parzystych wartości C . Zapewniają one parzystą liczbę chiralnych modów Majorany na brzegu, ale nie gwarantują automatycznie pojedynczego chronionego zerowego modu Majorany w wirze.

W opublikowanym tekście występuje ponadto kilka niespójności formalnych. Równanie (16) zawiera parametr U , mimo że główny hamiltonian t - J nie ma jawnego członu Hubbarda.



W końcowym akapicie dodatku A odwrócono wynik przedstawiony na rys. 11: zgodnie z rysunkiem jedna kopuła odpowiada mniejszemu U , a dwie większemu U , natomiast zdanie podsumowujące mówi odwrotnie. Najprawdopodobniej są to błędy redakcyjne, ale dotyczą one równań i wniosków istotnych dla interpretacji pracy.

Podsumowując, publikacja przedstawia oryginalny i fizycznie interesujący scenariusz topologicznego nadprzewodnictwa w $tWSe_2$. Jej najważniejszym osiągnięciem jest wykazanie, że spinowo-dolinowa struktura zespolonych całek przeskoku może prowadzić do mieszanego parowania $d + id/p - ip$ oraz przestrajalnych faz o różnych liczbach Cherna. Ograniczenia wynikają głównie z przybliżonego charakteru rzutowania Gutzwillera, pominięcia konkurencyjnych uporządkowań i niepełnego uzasadnienia parametrów modelu. Nie umniejszają one jednak wartości publikacji, a jedynie wyznaczają zakres, w którym jej wyniki należy traktować jako wiarygodne przewidywania wymagające dalszej weryfikacji.

3. Ocena publikacji „*Optimal superconductivity in twisted bilayer WSe_2 where the Van Hove singularity crosses half-filling*”

Kolejna publikacja wchodząca w skład rozprawy, zatytułowana „*Optimal superconductivity in twisted bilayer WSe_2 where the Van Hove singularity crosses half-filling*” i opublikowana w *Phys. Rev. Research*, stanowi rozwinięcie modelu analizowanego we wcześniejszej pracy. Jej zasadniczym celem jest już nie tylko wykazanie możliwości powstania chiralnego nadprzewodnictwa o mieszanej symetrii singletowo-trypletowej, lecz przede wszystkim wyjaśnienie, dlaczego faza nadprzewodząca zajmuje w diagramie fazowym stosunkowo wąski obszar i osiąga optimum w pobliżu połówkowego zapełnienia pasma.

Istotną wartością pracy jest próba powiązania optymalnego nadprzewodnictwa ze współdziałaniem dwóch efektów. Z jednej strony, przejście osobliwości van Hove’a przez poziom Fermiego zwiększa gęstość stanów, sprzyjając niestabilności nadprzewodzącej. Z drugiej strony, korelacje elektronowe związane z bliskością połówkowego zapełnienia prowadzą, w ramach zastosowanego przybliżenia Gutzwillera, do nierównomierniej renormalizacji poszczególnych składników oddziaływania. W szczególności odpychanie międzywęzłowe V ma być tłumione silniej niż wkład wymienny sprzyjający parowaniu. Proponowany obraz jest fizycznie atrakcyjny, gdyż nie utożsamia optimum nadprzewodnictwa wyłącznie z maksimum gęstości stanów, lecz wskazuje na jego korelacyjne wzmocnienie w szczególnym obszarze diagramu fazowego.

Wprowadzenie międzywęzłowego oddziaływania Coulomba V jest uzasadnionym i ważnym rozszerzeniem wcześniejszego modelu. Ze względu na przestrzenną rozległość orbitali Wanniera w materiałach moiré takie oddziaływanie nie powinno być z góry pomijane. Autorzy pokazują, że dla $V = 0$ nadprzewodnictwo obejmuje bardzo szeroki zakres zapełnień i pola przesunięcia D , natomiast odpowiednio duże V tłumi je poza niewielkim obszarem, w którym linia osobliwości van Hove’a przebiega w pobliżu połówkowego zapełnienia. Otrzymany diagram fazowy wykazuje dzięki temu jakościową zgodność z dostępnymi wynikami eksperymentalnymi. Interesującym rezultatem jest również możliwość otrzymania, w ramach jednego schematu teoretycznego, zarówno pojedynczego



CESAER

The strong and united voice of universities
of science and technology in Europe



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wrocławska
Wydział Podstawowych Problemów
Techniki
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław
T: +48 71 320 25 79
wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl
REGON: 000001614
NIP: 896-000-58-51
Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



maksimum nadprzewodnictwa, jak i dwóch obszarów nadprzewodzących rozdzielonych stanem Motta. Pozwala to jakościowo opisać różnice występujące pomiędzy próbkami o różnych kątach skręcenia lub różnej wartości stosunku U/W .

Do mocnych stron publikacji zaliczam ponadto wykorzystanie zależnych od pola D parametrów struktury pasmowej, przedstawienie wyników bezpośrednio w funkcji wielkości kontrolowanych eksperymentalnie oraz udostępnienie kodu i danych numerycznych. Wynik dotyczący chiralnego stanu $d + id/p - ipo$ niezerowej liczbie Cherna jest spójny z pierwszą pracą cyklu, a także z częścią niezależnych obliczeń wykorzystujących inne metody. Należy jednak pamiętać, że własności topologiczne tego stanu pozostają obecnie przede wszystkim przewidywaniem teoretycznym.

Główna wątpliwość dotyczy stopnia predykcyjności zaproponowanego mechanizmu. Wąski obszar nadprzewodnictwa uzyskano dla V wynoszącego około 22 meV, podczas gdy dla mniejszych wartości tego parametru faza nadprzewodząca jest znacznie bardziej rozległa. Nie jest dostatecznie jasne, czy wartość ta została wyprowadzona z niezależnego mikroskopowego oszacowania ekranowanego oddziaływania Coulomba, czy też dobrana fenomenologicznie w celu odtworzenia eksperymentalnego diagramu fazowego. Wyjaśnienia wymaga również przyjęta w części obliczeń relacja $V = U/3.635$. Analiza stabilności rezultatów względem zmian V/U , kąta skręcenia, ekranowania oraz oddziaływań dalszego zasięgu pozwoliłaby lepiej określić, na ile położenie optimum jest rzeczywistym przewidywaniem modelu.

Poważniejszego wyjaśnienia wymaga postać gutzwillerowskiej energii oddziaływania V . W podanym wyrażeniu człon proporcjonalny do $(1 - g_v^2)n_s^2$ występuje ze znakiem minus. W granicy $g_v \rightarrow 0$ prowadzi to pozornie do ujemnego wkładu energii pochodzącego od odpychającego oddziaływania V . We wzorze (3.17) w części wstępnej przyczynę od V jest dodatni. Kwestia ta powinna zostać jednoznacznie wyjaśniona, ponieważ centralny mechanizm pracy opiera się właśnie na renormalizacji oddziaływania V .

Wnioski dotyczące współdziałania osobliwości van Hove'a i korelacji są przekonujące jakościowo, ale opierają się głównie na porównaniu odpowiadających sobie map parametrów. Bardziej bezpośrednie potwierdzenie mechanizmu wymagałoby rozdzielenia obu efektów, na przykład przez niezależne przesuwanie osobliwości van Hove'a i zmianę czynników Gutzwillera. Także porównanie wyników dla różnych U nie jest czystym testem wpływu siły korelacji, ponieważ równocześnie zmieniają się $J = 4t^2/U$ oraz $V = U/3.635$. Jest to zatem porównanie różnych zestawów sprzężeń, a nie zmiana pojedynczego parametru.

Pozostałe ograniczenia częściowo powtarzają uwagi odnoszące się do poprzedniej publikacji. Dotyczą one możliwego podwójnego uwzględnienia procesów wymiany kinetycznej przy jednoczesnym zachowaniu U i przyjęciu $J = 4t^2/U$, a także zastosowania jednorodnego, niemagnetycznego ansatzu wariacyjnego. To ostatnie ograniczenie jest szczególnie istotne w pobliżu połowkowego zapętnienia, gdzie konkurować mogą stany antyferromagnetyczne, interwałowe i ładunkowe. Duże V , wykorzystane do tłumienia nadprzewodnictwa, może samo stabilizować porządek ładunkowy, którego nie uwzględ-



niono w rozpatrywanej klasie stanów. Uzyskany stan należy zatem traktować jako optimum wewnątrz ograniczonej przestrzeni wariacyjnej, nie zaś bezwarunkowo wyznaczony stan podstawowy modelu.

Ostrożności wymaga również oszacowanie T_c z wartości przerwy w temperaturze zerowej przy użyciu relacji BCS. W silnie skorelowanym układzie dwuwymiarowym rzeczywista temperatura przejścia może być ograniczona przez sztywność fazową i mechanizm Berezinskii-Kosterlitz-Thoulessa. Nie jest zatem uzasadnione zawarte w omówieniu rozprawy stwierdzenie, że otrzymane T_c jest niedoszacowane wskutek zerotemperaturowego charakteru metody Gutzwillera, a przyjęta procedura nie pozwala z góry określić kierunku błędu.

Podsumowując, publikacja przedstawia interesujący i fizycznie przejrzysty mechanizm optymalizacji nadprzewodnictwa, łączący osobliwość van Hove'a, silne korelacje i tłumienie odpychania międzywęzłowego. Jej szczególną wartością jest próba bezpośredniego odniesienia modelu do obserwowanego eksperymentalnie kształtu diagramu fazowego. Jednocześnie zależność rezultatów od fenomenologicznie przyjętego V , niejasność formuły opisującej energię tego oddziaływania oraz pominięcie konkurencyjnych faz ograniczają uniwersalność wniosków. Nowsze dane eksperymentalne, według których nadprzewodnictwo nie zawsze jest ściśle związane z osobliwością van Hove'a, sugerują ponadto, że zaproponowany mechanizm należy traktować jako istotny możliwy reżim, a nie uniwersalny warunek wystąpienia nadprzewodnictwa w skręconym dwuwarstwowym WSe_2 .

4. Ocena publikacji „*Superconductivity in moiré transition metal dichalcogenide bilayers: comparison of two distinct theoretical approaches*”

Trzecia z publikacji poświęconych nadprzewodnictwu w skręconym dwuwarstwowym WSe_2 , zatytułowana „*Superconductivity in moiré transition metal dichalcogenide bilayers: comparison of two distinct theoretical approaches*” i opublikowana w *Acta Physica Polonica B*, ma przede wszystkim charakter porównawczy i syntetyzujący. Doktorant, będący pierwszym autorem tej dwuautorskiej pracy, zestawia dwa odmienne scenariusze powstawania nadprzewodnictwa: lokalne przyciąganie opisane modelem Hubbarda z ujemnym U , prowadzące do konwencjonalnego stanu s -falogo, oraz korelacyjny model t - J - U , w którym powstaje chiralny stan o mieszanej symetrii singletowo-trypletowej $d + id/p - ip$.

Do zalet pracy należy wykorzystanie w obu podejściach tej samej części jednocząstkowej Hamiltonianu, uwzględniającej zależne od pola przesunięcia D zespolone całki przeskoku. Pozwala to przejrzysto zilustrować różnicę pomiędzy mechanizmem kontrolowanym przede wszystkim przez gęstość stanów a scenariuszem, w którym istotną rolę odgrywają również korelacje elektronowe. W modelu z ujemnym U amplituda parowania przemieszcza się razem z osobliwością van Hove'a, a i może pozostawać znaczna także z dala od połówkowego zapełnienia, jeżeli pole D utrzymuje dużą gęstość stanów na poziomie Fermiego. W modelu t - J - U renormalizacje typu Gutzwillera wprowadzają natomiast dodatkową preferencję dla obszaru bliskiego $n = 1$. W zależności od wartości U/W otrzymuje się pojedyncze maksimum nadprzewodnictwa albo dwa maksima rozdzielone



stanem izolującym. Praca dobrze podkreśla zatem, że sama osobliwość van Hove'a nie musi wystarczać do wyjaśnienia struktury eksperymentalnego diagramu fazowego.

Porównanie obu scenariuszy nie jest jednak w pełni równorzędne. Autorzy zmieniają jednocześnie Hamiltonian, mechanizm i symetrię parowania oraz metodę obliczeniową: model z ujemnym U analizowany jest w przybliżeniu Hartreego–Focka, podczas gdy model t - J - U traktowany jest metodą Gutzwillera. Nie można więc jednoznacznie rozstrzygnąć, czy różnice pomiędzy wynikami są skutkiem korelacji, nielokalnego charakteru oddziaływania J , przyjętej symetrii przerwy czy odmiennego poziomu przybliżenia. W tym sensie praca ilustruje konsekwencje dwóch zestawów założeń, ale nie stanowi kontrolowanego testu pozwalającego wybrać rzeczywisty mechanizm parowania.

Również utożsamienie modelu z ujemnym U z całym „konwencjonalnym” scenariuszem wymaga ostrożności. Model ten opisuje chwilowe, lokalne i niezależne od pędu przyciąganie, pomijając retardację, odpychanie Coulomba, zależność sprzężenia elektron-fonon od pędu oraz wpływ korelacji na samo oddziaływanie fononowe. Wykazano zatem ograniczenia najprostszego lokalnego modelu przyciągającego, lecz nie wykluczono bardziej realistycznego mechanizmu fononowego. Ponadto zgodność diagramu fazowego z lokalizacją nadprzewodnictwa w miejscu przecięcia osobliwości van Hove'a i półowkowego zapętnienia nie jest w całości wynikiem tej publikacji. Hamiltonian analizowany tutaj nie zawiera odpychania międzywęzłowego V ; dopiero jego dodanie w poprzedniej pracy cyklu zawęża obszar nadprzewodnictwa do otoczenia tego przecięcia.

Nie podano również wszystkich danych koniecznych do reprodukcji obliczeń, w szczególności wartości lub zależności parametru J , dokładnego kąta skręcenia, temperatury obliczeń oraz progu numerycznego, poniżej którego amplitudę parowania uznano za zerową. Jest to istotne, ponieważ w modelu z lokalnym przyciąganiem w temperaturze zerowej rozwiązanie nadprzewodzące może istnieć także poza zaznaczonym obszarem, lecz jego amplituda może być wykładniczo mała. Co więcej, wielkości określone w obu częściach pracy jako „superconducting gap” są w istocie różne znormalizowanymi anomalnymi wartościami oczekiwanymi – lokalną w jednym modelu i międzywęzłową, rozłożoną na różne reprezentacje symetrii, w drugim. Bardziej miarodajne byłoby porównanie fizycznych przerw kwazicząstkowych, energii kondensacji, temperatur przejścia lub sztywności fazowej.

Uwagi dotyczące możliwego podwójnego uwzględnienia wymiany kinetycznej w modelu t - J - U , ograniczeń jednorodnego ansatzu Gutzwillera oraz pominięcia konkurencyjnych stanów magnetycznych i ładunkowych powtarzają zastrzeżenia odnoszące się do poprzednich publikacji. W wersji pracy zamieszczonej w rozprawie występują ponadto konkretne uchybienia wymagające korekty. W panelach 2(d,e) wartości U są niespójne z panelami 2(a–c), a definicja parametru $\tilde{A}$ nie jest zgodna z kolejnością operatorów w równaniu (4). Bibliografia zawiera także zdublowaną pozycję (39 i 40).

Podsumowując, publikacja spełnia pożyteczną funkcję interpretacyjną: w czytelny sposób pokazuje, dlaczego diagram fazowy kontrolowany wyłącznie przez gęstość stanów różni się od obrazu uzyskanego po uwzględnieniu silnych korelacji. Jej wartość polega bardziej na uporządkowaniu i porównaniu wcześniejszych wyników niż na sformułowaniu całkowicie



nowego przewidywania. Wnioski nie rozstrzygają jednoznacznie pomiędzy konwencjonalnym i niekonwencjonalnym mechanizmem parowania, ale dostarczają użytecznego argumentu przemawiającego za istotną rolę korelacji elektronowych w nadprzewodnictwie skręconego WSe_2 .

5. Ocena publikacji „*Unconventional superconductivity in the presence of long-range interactions in transition metal dichalcogenide moiré heterobilayers*”

Ostatnia publikacja wchodząca w skład rozprawy, zatytułowana „*Unconventional superconductivity in the presence of long-range interactions in transition metal dichalcogenide moiré heterobilayers*” i opublikowana w *Scientific Reports*, rozszerza wcześniejsze badania na heterodwuwarstwę WS_2/WSe_2 . W przeciwieństwie do skręconego dwuwarstwowego WSe_2 nadprzewodnictwo nie zostało dotychczas zaobserwowane w tym układzie. Praca ma zatem wyraźnie predykcyjny charakter.

Autorzy rozpatrują rozszerzone modele t - J - U - V i t - J - V , wykorzystując parametry jednoczątkowe otrzymane wcześniej dla pasma walencyjnego WS_2/WSe_2 . Uwzględniono całki przeskoku i sprzężenia wymienne do trzecich sąsiadów oraz silne odpychanie między najbliższymi sąsiadami. Najważniejszym wynikiem jest przewidywanie chiralnego nadprzewodnictwa w silnie skorelowanym reżimie $U/W \simeq 2$, w wąskich zakresach wypełnień po obu stronach $n = 1$. Otrzymany stan ma mieszaną symetrię $d + id/p - ip$, z dominującym składnikiem trypletowym i liczbę Cherna $C = -4$. Dwa obszary nadprzewodzące są rozdzielone paramagnetycznym stanem Motta przy połówkowym wypełnieniu.

Za szczególnie wartościowe uważam wskazanie mechanizmu, który pozwala parowaniu przetrwać pomimo dużego odpychania V . W przybliżeniu Gutzwillera korelacje w pobliżu połówkowego wypełnienia zmniejszają czynnik renormalizujący V , a jednocześnie wzmacniają wkład wymienny odpowiedzialny za parowanie. Autorzy pokazują również, że dalsze całki przeskoku osłabiają nadprzewodnictwo wskutek obniżenia gęstości stanów, natomiast realistyczne wartości dalszych sprzężeń wymiennych mają niewielkie znaczenie. Przeprowadzenie obliczeń zarówno dla skończonego, jak i nieskończonego U , próba analitycznego wyjaśnienia wyników oraz udostępnienie kodu i danych stanowią dodatkowe zalety pracy.

Zakres oddziaływań określanych w tytule jako „long-range” jest jednak ograniczony. Oddziaływanie gęstość-gęstość V uwzględniono tylko dla najbliższych sąsiadów, natomiast do dalszych sąsiadów rozszerzono hopping i wymianę. Nie zbadano więc wpływu rzeczywistego ekranowanego „ogona” Coulomba, obejmującego $V_2, V_3, \dots$, mimo że jego znaczenie sugerują obserwowane w tym materiale kryształy Wignera. Wynik należy zatem interpretować jako odporność parowania na duże V_1 , a nie na pełne oddziaływanie dalekiego zasięgu.

Najważniejsze ograniczenie fizyczne wiąże się z przyjęciem jednorodnego ansatzu bez porządku magnetycznego i ładunkowego. Przy $U \sim 2W$ oraz $V \sim U/3$ konkurencja ze stanami antyferromagnetycznymi, paskowymi, ładunkowymi lub PDW może być istotna. Argument, że znane kryształy Wignera występują przy innych, współmiernych wypełnie-



CESAER

The strong and united voice of universities
of science and technology in Europe



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wrocławska

Wydział Podstawowych Problemów
Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



niach, nie zastępuje bezpośredniego porównania energii konkurencyjnych faz. Co więcej, lokalny projektor Gutzwillera prowadzi z samej swojej konstrukcji do silnego tłumienia efektywnego V przy $n = 1$. Nie jest oczywiste czy ta „ochrona” nadprzewodnictwa przetrwa po zastosowaniu metody traktującej korelacje nielokalne, np. VMC lub DMRG. Uzyskany diagram należy więc traktować jako diagram w ograniczonej przestrzeni stanów wariacyjnych.

Powracają również omówione wcześniej wątpliwości dotyczące równoczesnego zachowania U i przyjęcia $J_t = 4|t_t|^2/U$. W rozszerzonym modelu Hubbarda energia procesów wirtualnych powinna zależeć także od V , prowadząc w najprostszym ujęciu do mianownika $U - V$. Przy $V = U/3$ zmieniałoby to wartość J o około 50%. Również modelowanie wpływu kąta skręcenia poprzez zmianę samego U , przy ustalonych hoppingach i stałym U/V , jest tylko jakościowe. Kąt i środowisko dielektryczne zmieniają równocześnie szerokość pasma, funkcje Wanniera oraz cały zestaw oddziaływań. Stwierdzenie, że zmniejszanie kąta zwiększa samo U , powinno być zastąpione ostrożniejszym stwierdzeniem o wzroście stosunku U/W .

W pracy występuje ponadto pewien problem ilościowy. Dla podanej przerwy $\Delta(0) \approx 0.016$ meV relacja BCS daje $T_c \approx 0.105$ K, a nie około 1 K, jak stwierdzono w tekście. Rzeczywista temperatura przejścia, dodatkowo obniżona przez fluktuacje fazowe, może być jeszcze mniejsza. W ostatnim z równań (14) występuje literówka $n_{i\uparrow}n_{j\downarrow}$ zamiast lokalnego $n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$.

Podsumowując, praca przedstawia interesujące i eksperymentalnie weryfikowalne przewidywanie nadprzewodnictwa w heterodwuwarstwie WS_2/WS_2 . Jej mocną stroną jest materiałowa specyficzność, analiza wpływu dalszych całek przeskoiku oraz wskazanie mechanizmu pozwalającego parowaniu przetrwać przy dużym V . Uniwersalność wniosków w pewnym stopniu ograniczają jednak przybliżenie Gutzwillera, pominięcie konkurencyjnych faz oraz niepełne potraktowanie oddziaływań dalekiego zasięgu.

6. Podsumowanie

Rozprawa stanowi spójne studium nadprzewodnictwa w płaskich pasmach układów moiré opartych na dichalkogenkach metali przejściowych. Jej zasadniczym celem jest określenie, w jakich warunkach silne korelacje elektronowe, struktura pasmowa oraz oddziaływania międzywęzłowe mogą prowadzić do niekonwencjonalnego i topologicznego stanu nadprzewodzącego. Przedstawione badania koncentrują się przede wszystkim na skręconym dwuwarstwowym WS_2 , a następnie zostają rozszerzone na heterodwuwarstwę WS_2/WS_2 .

Do najważniejszych wyników należy przewidzenie mieszanego stanu singletowo-trypletowego o symetrii $d + id/p - ip$, łamiącego symetrię odwrócenia czasu i charakteryzującego się niezerową liczbą Cherna. Autor analizuje wpływ wypełnienia, pola przesunięcia, siły korelacji oraz odpychania międzywęzłowego na stabilność tej fazy. Szczególnie interesująca jest zaproponowana interpretacja optymalnego nadprzewodnictwa jako rezultatu współdziałania dużej gęstości stanów w pobliżu osobliwości van Hove’a i renormalizacji korelacyjnych blisko połówkowego wypełnienia. W ostatniej pracy sformułowano ponadto konkretne, dotychczas niepotwierdzone doświadczalnie przewidywanie nadprzewodnictwa



unite!

University Network for Innovation
Technology and Engineering

CESAER

The strong and united voice of universities
of science and technology in Europe



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wrocławska

Wydział Podstawowych Problemów
Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 00001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Politechnika Wrocławska

Instytut Fizyki Teoretycznej

w heterodwuwarstwie WS_2/WSe_2 . Mocną stroną rozprawy jest konsekwentne odnoszenie wyników do diagramów eksperymentalnych oraz analiza parametrów, które mogą być kontrolowane za pomocą bramek, kąta skręcenia i środowiska dielektrycznego. Publikacje wchodzące w skład cyklu ukazały się w *Physical Review B*, *Physical Review Research*, *Acta Physica Polonica B* i *Scientific Reports*, a deklaracje wkładu autorskiego potwierdzają znaczący udział doktoranta w obliczeniach i analizie wyników.

Wnioski rozprawy należy jednak traktować jako uwarunkowane przyjętymi modelami i ograniczoną przestrzenią wariacyjną. Najważniejsze zastrzeżenia dotyczą możliwego podwójnego uwzględnienia procesów wymiany w modelach t - J - U , fenomenologicznego doboru części parametrów oraz pominięcia konkurencyjnych stanów magnetycznych, ładunkowych, nematycznych i PDW. Przybliżenie Gutzwillera może również przeceniać tłumienie odpychania międzywęzłowego w pobliżu stanu Motta. Związek nadprzewodnictwa z osobliwością van Hove'a nie wydaje się ponadto uniwersalny w świetle najnowszych danych eksperymentalnych. We wstępie i składających się na rozprawę publikacjach występują też pewne niejasności notacyjne oraz kilka błędów we wzorach i oszacowaniach liczbowych, które powinny zostać wyjaśnione podczas obrony.

Mimo wymienionych ograniczeń, które są zupełnie naturalne w tego rodzaju pracach, rozprawa przedstawia oryginalny, konsekwentnie rozwijany program badawczy i wnosi wartościowy wkład w teorię silnie skorelowanych układów moiré. Doktorant wykazał umiejętność budowy modeli efektywnych, prowadzenia zaawansowanych obliczeń wariacyjnych oraz krytycznego odnoszenia wyników do eksperymentu. **Całość oceniam bardzo pozytywnie i uważam, że rozprawa Pana mgr. Waseema Akbara p.t.: „Unconventional superconductivity, topology and strong electronic correlations in two dimensional transition-metal dichalcogenide moiré bilayers” spełnia wymagania stawiane pracom doktorskim w ustawie Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. W szczególności stwierdzam, że rozprawa prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną kandydata w dyscyplinie nauki fizyczne oraz zawiera oryginalne rozwiązanie problemu naukowego.**


Maciej Maśka



CESAER
The strong and united voice of universities
of science and technology in Europe



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wrocławska
Wydział Podstawowych Problemów
Techniki
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław
T: +48 71 320 25 79
wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl
REGON: 00001614
NIP: 896-000-58-51
Nr konta:
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434