

Kraków 23.12.2016

prof. dr hab. inż. Bartłomiej Szafran
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
al. Mickiewicza 30, 30-059

Recenzja
pracy doktorskiej Pani mgr Anny Skubis p.t.

Symulacje działania bramek kwantowych wykonujących operacje na spinie elektronu

Rozprawa została wykonana pod opieką prof. Stanisława Bednarka na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH. Rozprawa obejmuje 95 stron (w tym pięć rozdziałów oraz bibliografia jako sekcja szósta rozprawy). Tytułowe symulacje oparte są na rozwiązaniu równania Schroedingera zależnego od czasu oraz równania Poissona. To ostatnie wyznacza potencjał w strukturach modelowych na bazie dwuwymiarowego gazu elektronowego z nałożonymi na strukturę elektrodami bramek pozwalających na kontrolę ruchu elektronu oraz formowanie potencjału uwięzienia. Modelowanie równania Schroedingera wykonane w przybliżeniu masy efektywnej obejmuje sprzężenie spin-orbita, które ruch elektronu wiąże ze zmianami stanu spinowego nośnika. Głównym celem pracy jest symulacja działania urządzenia z pracy Kim Nowack *i innych*, *Coherent control of a single electron spin with electric fields* Science 318, 1430 (2007). Praca doświadczalna dotyczy zjawiska znoszenia blokady Pauliego prądu płynącego sekwencyjnie przez układ podwójnych kropek kwantowych pod wpływem zmiennego pola elektrycznego. Zmienne pole elektryczne za pośrednictwem sprzężeń spin-orbita typu Rashby oraz Dresselhaus, powoduje przejścia Rabięgo z przerzutem spinu, co odblokowuje przepływ prądu. Układy, które autorka bada, mają działać jak bramka negacji oraz bramka Hadamarda.

Rozdział drugi podaje szczegółowy opis modelowej nanostruktury, z heterozłączeniem n-AlGaAs / GaAs oraz zestawem sześciu bramek definiowanych na powierzchni struktury. Potencjał uwięzienia dla kropki kwantowej wyliczany jest z równania Poissona, z separacją uwięzionego ładunku jako źródła części potencjału. Rachunek uwzględnia zależność rozkładu zjonizowanych domieszek od potencjału. W dużej odległości od układu elektrod potencjał zależy tylko od położenia w kierunku wzrostu i dla niego podane jest rozwiązanie problemu Poissona-Schroedingera z uzgodnieniem potencjału oraz ładunków. Jako wynik (rysunek 3) uzyskuje się profil potencjału w kierunku wzrostu z trójkątną studnią potencjału dla dwuwymiarowego gazu elektronowego oraz wartością asymptotyczną jego gęstości daleko od bramek. W pobliżu elektrod wartość asymptotyczna używana jest do przybliżenia lokalnej gęstości ładunku zależnie od lokalnego potencjału oraz energii Fermiego. Warunki brzegowe przyjęte są w formie Dirichleta na elektrodach oraz Neumanna na brzegach pudła obliczeniowego. Te ostatnie uzasadnione są przez symetrię potencjału daleko od elektrod oraz neutralność pudła obliczeniowego jako całości. Rachunek pozwala na wyznaczenie potencjału uwięzienia i obszaru dostępnego dla gęstości elektronowej zależnie od przyłożonych napięć, w tym opisuje separację wyspy ładunku od rezerwuarów – czyli wyindukowanie kropki kwantowej w dwuwymiarowym gazie. Potencjał panujący w strukturze, a w szczególności jego kształt w kierunku wzrostu, pozwala na wyznaczenie wartości stałych sprzężenia Rashby oraz Dresselhaus, przez odpowiednio pole elektryczne na heterozłączy oraz szerokość obszaru zajętego przez

gaz elektronowy. Obydwie stałe sprężenia są zależne od napięć i przyjęty model zależności tą pozwala uwzględnić. Autorka tłumaczy, że w dalszej części modelowania zakłada studnię kwantową pochodzenia strukturalnego w kierunku wzrostu, co pozwala zredukować liczbę stopni swobody do dwóch przez ograniczenie ruchu elektronów w kierunku wzrostu oraz zwiększyć stałą sprężenia Dresselhausa.

Rozdział trzeci opisuje symulacje obrotu spinu. Rachunek wykonywany jest dla funkcji falowej w formie spinora metodą różnic skończonych. Dla wyznaczenia warunków początkowych autorka poszukuje stanu podstawowego metodą ewolucji układu w czasie urojonym. Pakiet falowy podlega ruchowi wymuszonemu przez zmienny potencjał podany na jedną lub kilka elektrod. Ruch pakietu przez sprzężenie spin orbita wywołują zmianę średniej wartości składowej z-owej spinu. Autorka pokazuje, że urządzenie po około 2 ns przeprowadza spin elektronu z pozycji up do pozycji down. Przedyskutowany został problem optymalizacji napięć ustawiających punkt pracy urządzenia w kontekście stabilności pakietu falowego oraz czasu inwersji spinu. W części 3.5 autorka pokazuje, iż stopień inwersji spinu zależy od dostrojenia zewnętrznego pola magnetycznego do wartości rezonansowej przy ustalonej częstotliwości zmiennego pola elektrycznego / drgań pakietu falowego. W części 3.6 pokazano, że oscylacja Rabięgo przerwana w połowie działa jak bramka Hadamarda na spinie elektronu. W części 3.7 podano dyskusję czasu inwersji spinu. W zakresie częstotliwości wymuszenia od 5 do 35 GHz tempo przejść Rabięgo rośnie liniowo – zgodnie z wynikiem doświadczalnym w granicy małych częstotliwości wymuszenia. Przy wyższych częstotliwości wymuszenia symulowany pakiet falowy ulega destabilizacji, co nakłada ograniczenie na maksymalne tempo przejścia. Część 3.8 omawia związek obrotu spinu z trajektorią elektronu i wskazuje, iż dla ruchu pakietu po zamkniętej pętli możliwe są obroty spinu bez zewnętrznego pola magnetycznego. Dla oscylacji pakietu w jednym tylko kierunku, obroty wymagają obecności zewnętrznego pola magnetycznego.

Rozdział 4 stanowi najważniejszą część pracy i omawia możliwość skrócenia czasu przerzutu spinu. Zaprojektowany układ zakłada silne uwięzienie strukturalne elektronu w kierunku wzrostu oraz stosunkowo silne uwięzienie elektrostatyczne w jednym z kierunków w płaszczyźnie. Ruch elektronu jest prawie jednowymiarowy, a wzbudzenia w poprzek wyeliminowane, co pomaga w stabilizacji pakietu. Ceną jaką należy zapłacić za jednowymiarowy ruch jest konieczność wprowadzenia składowej zewnętrznego pola magnetycznego równoległej do osi oscylacji pakietu aby możliwe były obroty spinu. W nowym układzie możliwe okazało się zachowanie stabilności pakietu aż do częstotliwości 150 GHz. Powyżej 150GHz pakiet zaczyna akumulować energię od zmiennego pola elektrycznego i ulega destabilizacji. Omówiona zostaje również maksymalna amplituda oscylacji zmiennego pola, przy której pakiet zachowuje stabilność. Ostatecznie czas przerzutu spinu zostaje zredukowany do 150 ps i trzech oscylacji położenia pakietu. Rozdział kończy dyskusja czułości ewolucji czasowej na wartość stałej Dresselhausa oraz opis ruchu w potencjale parabolicznym.

Rozprawa nie jest wolna od błędów edytorskich i formalnych. Brak jest przewidzianego ustawa streszczenia w języku angielskim. Zdarzają się literówki: „krztałt” na podpisie do rysunku 37, „gHz” w podsumowaniu, „assymetry” zamiast „asymmetry” na stronie 32, tamże A zamiast \hat{A} , oraz A^3 zamiast \hat{A}^3 . Strona 38: „jego funkcje uwzględniająca” zamiast „jego funkcję uwzględniającą”. W pracy pisanej po polsku napisy na rysunkach powinny być konsekwentnie po polsku, a na rysunku 1 podane są po angielsku. Na stronie 41 we wzorze na potencjał Φ_{el} „środek ciężkości chmury elektronowej” to moim

zdaniem r_{el} a r to miejsce na brzegu pudła obliczeniowego. Język, jakim pisana jest praca jest klarowny, choć miejscami potoczny – jak w przypadku wskazanej tutaj „chmury elektronowej”. Podobnie w pracy pojawia się „prawidłowa wartość parametru”, „gorsze ustawienie spinu”, „szybsze funkcje bramek” (strona 66).

Szkoda, że w pracy nie znalazł się komentarz o poprawkach korelacyjno-wymiennych do potencjału Hartree używanego w rozwiązaniu równań Poissona-Schroedingera dla zbramkowanego gazu elektronowego. Brakuje również komentarza o zbieżności i stabilności metod całkowania równań po czasie. Przejścia spinowe, które autorka opisuje wykorzystują precesję spinu w efektywnym polu magnetycznym pochodzącym w całości lub części od sprzężenia spin-orbita. Wyobrażam sobie, że przerzuty spinu można uzyskać również rezonansowo dla zmiennego pola elektrycznego o częstotliwości dobranej do rozszczepienia spinowego przy silnym uwięzieniu pakietu w płaszczyźnie. Wtedy ruch środka pakietu jest zaniedbywalny, a jego stabilność nie stanowi problemu dla radykalnego zwiększenia amplitudy zmiennego pola elektrycznego. Czy istotnie słabsze uwięzienie w płaszczyźnie i oscylacje pakietu o zasięgu rzędu 200 nm są optymalne dla czasu przerzutu spinu? Jaki jest związek długości oscylacji z tym czasem?

Według ustawy o stopniach i tytule naukowym rozprawa doktorska przygotowana pod opieką promotora powinna stanowić oryginalne rozwiązanie problemu naukowego oraz wykazywać ogólną wiedzę teoretyczną kandydata w danej dyscyplinie i może mieć formę manuskryptu książki. W mojej ocenie przedstawiony do recenzji dokument spełnia te wymogi: ma formę manuskryptu książki, został przygotowany pod opieką promotora oraz zawiera oryginalne rozwiązanie problemu naukowego: w szczególności optymalizacji czasu przerzutu spinu dla pakietu falowego w zaprojektowanej w tym celu strukturze. Badania zostały oparte na solidnej i uwiarygodnionej publikacjami metodologii, przedstawioną w sposób przystępny w rozprawie. Dorobek doktorantki to dwie publikacje (Journal of Physics Condensed Matter oraz Applied Physics Letters), w których jej pozycja na liście autorów nie wskazuje na wiodący udział w ich przygotowaniu. Obydwie publikacje z udziałem doktorantki dotyczą jednak operacji na spinie bez zewnętrznego pola magnetycznego, podczas gdy najważniejszy dla rozprawy rozdział 4 to pole wykorzystuje. Uzyskane w rozprawie wyniki są jednak ważne, ponieważ redukcja czasu potrzebnego do przerzutu spinu jest kluczowa, aby bramki logiczne mogły wykonać odpowiednią liczbę operacji przed defazacją spinu. Moim zdaniem minimalne wymogi stawiane formalnie i zwyczajowo rozprawa spełnia i wnioskuje o dopuszczenie doktorantki do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Bartłomiej Kępczyński