
UNIWERSYTET M. CURIE – SKŁODOWSKIEJ

Tel: (+48) 81 – 537 62 41
Fax: (+48) 81 – 537 61 91
Email: doman@kft.umcs.lublin.pl
Web: <http://kft.umcs.lublin.pl/doman>

Prof. dr hab. Tadeusz Domański
Zakład Teorii Fazy Skondensowanej
Instytut Fizyki UMCS w Lublinie

Lublin, 14 sierpnia 2017 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej pani mgr inż. Edyty Osiki pt. „**Dynamics of spin-valley transitions in carbon nanotube quantum dots**”

Praca doktorska pani Edyty Osiki została wykonana na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej w Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie. Promotorem rozprawy jest prof. dr hab. inż. Bartłomiej Szafran. Rozprawa doktorska ma charakter teoretyczny i dotyczy wpływu oddziaływań spinowo-orbitalnych na właściwości pojedynczych oraz podwójnych kropek kwantowych wbudowanych elektrostatycznie w ugiętych nanorurkach węglowych. Zasadniczym celem przeprowadzonych badań była analiza przejść zaindukowanych periodycznym polem elektrycznym z uwzględnieniem zmiany konfiguracji spinowej i/lub dolinowej spowodowanej ugięciem nanorurki albo obecnością kwantowych defektów. Jest to bardzo aktualna problematyka i ma ściśle odniesienie do pomiarów doświadczalnych np. techniką elektrycznego dipolowego rezonansu spinowego oraz za pomocą spektroskopii tunelowania wspomaganą absorpcją mikrofal.

Na treść rozprawy doktorskiej składa się cykl sześciu spójnych tematycznie publikacji, w których Doktorantka jest pierwszym autorem. Na podstawie deklaracji Promotora wnioskuję, że udział pani mgr inż. Edyty Osiki w uzyskaniu wyników opublikowanych w wymienionych pracach był zasadniczy. Doktorantka dołączyła zwięzły opis motywacji swoich badań, wykaz najważniejszych wyników diskutowanych w poszczególnych artykułach, podsumowanie i wnioski oraz informację o przebiegu dotychczasowej działalności badawczej. Aktualny dorobek publikacyjny Doktorantki obejmuje aż osiem artykułów w bardzo poważnych czasopismach (5 artykułów w *Phys. Rev. B*, 2 prace w *J. Phys.: Con-*

dens. Matter oraz 1 publikacja wieloautorska w renomowanym Phys. Rev. X). Badania były częściowo finansowane przez granty Narodowego Centrum Nauki, w których pani mgr inż. E. Osika uczestniczyła w charakterze wykonawcy (w grantie Opus) oraz jako kierownik (w grantie Etiuda). W ramach realizacji grantu Etiuda odbyła 6-miesięczny staż w Instytucie Nauk Fonicznych w Barcelonie (Hiszpania) natomiast wcześniej uczestniczyła w 3-miesięcznych szkoleniach organizowanych przez DESY w Hamburgu (Niemcy) oraz AGH w Krakowie. Doktorantka brała udział w wielu międzynarodowych konferencjach specjalistycznych (przedstawiając 10 prezentacji posterowych i 1 wykład) oraz krajowych seminariach (gdzie wygłosiła 2 referaty). Niewątpliwie aktywność naukowo-badawcza mgr inż. Edyty Osiki jest imponująca. W dalszej części przedstawię merytoryczną ocenę wyników prezentowanych w publikacjach, stanowiących treść niniejszej rozprawy doktorskiej.

Pierwsza z cyklu prac opisuje dynamikę przejść spinowych i dolinowych zaindukowanych zmiennym polem elektrycznym w pojedynczej kropce kwantowej wytworzonej elektrostatycznie w nanorurce węglowej. Obliczenia teoretyczne przeprowadzono dla konfiguracji typu zygzak (tzn. o charakterze półprzewodnikowym), rozpatrując przypadek prostej oraz ugiętej nanorurki. Do opisu układu zastosowano podejście mikroskopowe oparte na modelu ciasnego wiązania z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita (w tym poprzez modyfikację całki przeskoku z powodu ugięcia nanorurki), pola magnetycznego oraz periodycznego pola elektrycznego o ustalonej częstotliwości ω . W pierwszej kolejności wyznaczono stany stacjonarne kropki kwantowej (rozumianej jako potencjał typu gaussowskiego o szerokości połówkowej d i głębokości V_0) a następnie zbadano efekty dynamiczne spowodowane polem elektrycznym i nieporządkiem. W tym celu rozwiązano numerycznie układ równań ruchu na współczynniki rozwinięcia funkcji falowej w bazie stanów własnych hamiltonianu stacjonarnego, stosując schemat Cranka-Nicolsona. Z przeprowadzonej analizy wyciągnięto kilka cennych wniosków fizycznych. W prostych nanorurkach przejścia z odwracaniem spinu lub doliny nie realizują się. Proces odwrócenia spinu wymaga złamania symetrii kątowej (obwodowej). Jest to możliwe do uzyskania poprzez ugięcie nanorurki lub zastosowanie poprzecznego pola elektrycznego. Zmienne pole elektryczne (skierowane prostopadle do nanorurki) jest w stanie zaindukować takie procesy z charakterystycznym czasem, który jest odwrotnie proporcjonalny do amplitudy pola. Do zmiany dolinowego stopnia swobody niezbędne są natomiast kwantowe defekty (czyli krótkozasięgowe centra rozpraszania). Taki rodzaj nieporządku istotnie zaburza kątową symetrię stanów własnych, nawet gdy defekt jest odległy od obszaru kropki kwantowej. Przejścia międziodolinowe realizują się w skali czasowej o 2 lub 3 rzędy wielkości większej od przejść spinowych i są niewrażliwe na zmienne pole elektryczne. Ponadto, uwzględniając wyrazy wyższego rzędu w rachunku zaburzeń, wykazano pojawienie się frakcyjnych linii rezonansowych w zgodności z wynikami doświadczalnymi grupy Leo Kouwenhovena z Uniwersytetu Technicznego w Delft (Holandia).

W drugiej pracy zbadano stacjonarne właściwości układu dwóch kropek kwantowych w półprzewodnikowej nanorurce węglowej. W tym celu rozpatrzono zestaw dwóch potencjałów gaussowskich z amplitudą dodatnią (typu p) oraz ujemną (typu n) oddalonych od siebie o 10 nanometrów. W tym przypadku efekt ugięcia nanorurki nie był brany pod uwagę. Analizę stanów elektronowych przeprowadzono w oparciu o ścisłą diagonalizację modelu ciasnego wiązania (analogicznego do opisanego w pierwszej pracy) i stwierdzono, że widmo energetyczne układu ambipolarnego jest jakościowo odmienne w porównaniu z przypadkiem uniplornym. Efekt ten klarownie ilustrują rysunki 5 i 6. Dla układu ambipolarnego stany wywodzące się z pasm walencyjnych oraz pasm przewodnictwa wykazują tendencję tzw. *avoided crossing* w punktach neutralności, co jest konsekwencją ich hybrydyzacji (mieszania). Ponadto zbadano rolę oddziaływań kulombowskich oraz charakter stanów dwu-elektronowych, uwzględniając konfiguracje typu singletowego i trypletowego. Ta syntetyczna praca dostarcza informacji o właściwościach podwójnych kropek kwantowych (uniplornych i ambipolarnych) w nanorurkach węglowych o prostym kształcie. W szczególności zbadano energię wymiany, określono wpływ nieporządku, uwzględniono cechy dużych kropek kwantowych i zbadano rolę chiralności.

W trzeciej publikacji zbadano rolę oddziaływań spinowo-orbitalnych (SO) zaindukowanych ugięciem nanorurki węglowej. Procedura obliczeń polegała na oszacowaniu spinowo-zależnej całki przeskoku $t_{ij}^{\sigma\sigma'}$, według schematu stosowanego wcześniej w literaturze do określenia oddziaływań SO w prostych nanorurkach. Do oszacowania wartości liczbowych rozpatrzono przypadek, w którym promień krzywizny ugięcia ($R = 30$ nm) był dużo większy od promienia nanorurki ($r = 0,78$ nm). Zgodnie z oczekiwaniami wartości liczbowe sprzężenia okazały się bardzo niewielkie. Nie mniej jednak, stwierdzono istotny wpływ wygenerowanego oddziaływania na dynamikę przejść spinowych i ładunkowych wywołanych zmiennym polem elektrycznym w układzie podwójnej kropki kwantowej (typu unipolarnego). Proces przejścia elektronu między kropkami z odwracaniem spinu uległ kilkukrotnemu skróceniu pod wpływem ugięcia nanorurki. W przypadku kropek kwantowych o kształcie gaussowskim w kierunku ugięcia nanorurki (czyli wzdłuż osi x) szybkość przejścia z odwracaniem spinu wzrosła aż 40-krotnie. W pracy zbadano również efekty nieliniowe w obecności silnych pól elektrycznych oraz przejścia międzypolinowe spowodowane defektem kwantowym, tzn. brakującym atomem węgla.

Czwarty artykuł analizuje właściwości podwójnej kropki kwantowej (typu ambipolarnego) ugiętej nanorurki węglowej w kontekście wyników doświadczalnych uzyskanych przez grupę L. Kouwenhovena [Nature Nanotechnol. **8**, 565 (2013)]. W tym przypadku potencjały kropek kwantowych modelowano kształtem zbliżonym do studni/bariery z niewielkim rozmyciem brzegowym. W takim układzie kropka kwantowa typu n może pułapkować elektrony z pasma przewodnictwa natomiast kropka kwantowa typu p odpowiednio dziury z pasma walencyjnego. Uwzględniając oddziaływania kulombowskie zbadano konfigurację (1e,1h) w pobliżu punktu neutralności i wykazano, że w nieobecności

pola magnetycznego konfiguracja niskoenergetyczna składa się ze spinowo-dolinowego singletu oraz trzech stanów trypletowych oddzielonych energią wymiany. W oparciu o ścisłą diagonalizację zbadano prawdopodobieństwa przejść między nimi indukowanych zmiennym polem elektrycznym ze wzięciem uwagi na zależności od wartości pola magnetycznego i jego kierunku (wzdłuż osi nanorurki lub w kierunku ugięcia) oraz różnych rodzajów ugięcia nanorurki. W przypadku prostopadłego pola magnetycznego wykazano, że profilowaniem wygięcia nanorurki możliwe jest kontrolowalne sterowanie wartością efektywnego czynnika g .

Piąty artykuł jest ciekawym rozszerzeniem poprzedniej pracy. Zastosowano w nim komplementarne podejście do analizy periodycznego pola elektrycznego, bazujące na teorii Floqueta. Metoda ta traktuje aspekt czasowej periodyczności w sposób analogiczny jak formalizm Blocha uwzględnia niezmienniczość translacyjną w przestrzeni rzeczywistej. Od strony numerycznej zadanie sprowadzało się do obliczenia elementów macierzowych, biorąc pod uwagę odpowiednią liczbę składowych harmonicznych (w omawianej pracy wykorzystano 800 harmonik). Przeprowadzona analiza wskazała na istotne znaczenie stanu $(0e,0h)$ dla widma przejść. Uwzględnienie pośredniej roli takiego stanu skutkowało znacznym przesunięciem energii przejść (w stronę wyższych wartości) i w konsekwencji wpłynęło na obniżenie efektywnej wartości czynnika g dla aksjalnego pola magnetycznego. Wymienione efekty zależą zarówno od amplitudy pola elektrycznego jak też przyłożonego napięcia między kropkami kwantowymi. W tym kontekście zbadano również efekty nieliniowe, tzn. frakcjonalne rezonanse spowodowane procesami multi-fotonowymi.

W ostatniej publikacji zbadano proces transferu elektronowego realizowanego w unipolarnym układzie kropek kwantowych ze wspomaganie absorpcji fotonowej. Obliczenia prawdopodobieństw w funkcji napięcia Δ między kropkami kwantowymi wykonano dla potencjałów o kształcie gaussowskim w konfiguracjach pp oraz nn . Dla układu pp zbadano przepływ ładunku w procesie przejścia $(1h,0) \rightarrow (0,1h)$, kiedy bezpośrednie przejścia są dopuszczalne bez konieczności zmiany konfiguracji spinowo-dolinowej. Wyniki przedstawione na rysunkach 3-5 pięknie ilustrują przejścia jedno- i wielo-fotonowe zaindukowane zmiennym polem elektrycznym w zależności od jego amplitudy. Poza wyraźnymi wzmocnieniami można także zauważyć efekty kwantowej interferencji, spowodowane różnicą faz między stanami $(0,1h)$ i $(1h,0)$. Wyniki te poprawnie odtwarzają doświadczalną obserwację interferencji Landaua-Zenera-Stueckelberga z pracy Phys. Rev. B **93**, 235428 (2016). Natomiast dla układu nn zbadano prawdopodobieństwo przepływu elektronowego w procesie przejścia ze stanu $(1e,1e)$ do stanu $(0,2e)$, który jest możliwy wyłącznie poprzez odwrócenie spinowych lub dolinowych stopni swobody. Takie przejścia mogą realizować się w wyniku ugięcia nanorurki lub poprzez wprowadzenie defektów kwantowych. W odróżnieniu od poprzedniej sytuacji prawdopodobieństwo przejść charakteryzuje się wąskimi liniami rezonansowymi (rysunek 7), tzn. bez ciągłego tła.

W podsumowaniu stwierdzam, że pani mgr inż. Edyta Osika przeprowadziła bogatą analizę właściwości pojedynczych i podwójnych kropek kwantowych utworzonych elektrostatycznie (poprzez odpowiednio wyprofilowane potencjały pułapkujące) w nanorurkach węglowych o kształcie prostym i ugiętym. Za szczególnie istotne uważam zbadanie wpływu krzywizny nanorurek na uaktywnienie dynamicznych przejść ze zmianą spinowych i doli-nowych stopni swobody (które w nanorurkach prostych i bez domieszek są wzbronione). Za wysoce nietrywialne należy też uznać zastosowanie formalizmu Floqueta do analizy periodycznego pola elektrycznego. Bardzo interesujące jest również zjawisko przepływu ładunku pomiędzy kropkami kwantowymi (pod wpływem przyłożonego napięcia) oraz in-terferencji Landaua-Zenera-Stuckelberga w procesach z absorpcją fotonową. Współczesne metody doświadczalne dają możliwość precyzyjnych pomiarów przepływu ładunku z roz-dzielczością czasową oraz wyznaczenia dynamicznych funkcji korelacyjnych. Chciałbym więc zasugerować rozszerzenie metod wykorzystywanych w niniejszej pracy doktorskiej do obliczenia charakterystyk dynamicznych, takich jak szum śrutowy (*shot noise*) i podobne. Oczywiście nie mam żadnych uwag krytycznych do opublikowanych prac, ponieważ zostały wcześniej zweryfikowane przez kompetentnych ekspertów. Jeśli zaś chodzi o wstępny frag-ment rozprawy doktorskiej (29 stron), jest on napisany klarownym językiem oraz starannie zredagowany świadcząc o dogłębnej znajomości Doktorantki w problematyce badawczej.

Rozprawa spełnia zwyczajowe i formalne warunki stawiane rozprawom doktorskim w ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003 r. z późniejszymi zmianami. Niniejszym przekazuję więc wniosek do Rady Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie o dopuszczenie pani magister inżynier Edyty Osiki do publicznej obrony pracy doktorskiej oraz dalszych etapów Jej przewodu doktorskiego. Jednocześnie, ze względu na wybitne osiągnięcia badawcze Doktorantki (uzasadnione w osobnym załączniku), składam również wniosek o wyróżnienie przedłożonej rozprawy doktorskiej.

Jacek Domański

UNIWERSYTET M. CURIE – SKŁODOWSKIEJ

Tel: (+48) 81 – 537 62 41
Fax: (+48) 81 – 537 61 91
Email: doman@kft.umcs.lublin.pl
Web: <http://kft.umcs.lublin.pl/doman>

Prof. dr hab. Tadeusz Domański
Zakład Teorii Fazy Skondensowanej
Instytut Fizyki UMCS w Lublinie

Lublin, 14 sierpnia 2017 r.

Uzasadnienie wniosku o wyróżnienie rozprawy doktorskiej pani mgr inż. Edyty Osiki pt. „Dynamics of spin-valley transitions in carbon nanotube quantum dots”

Praca doktorska mgr inż. Edyty Osiki przedstawia systematyczną analizę właściwości pojedynczych i podwójnych kropek kwantowych utworzonych przez odpowiednio wyprofilowane potencjały pułapkujące w nanorurkach węglowych. Na wysoki stopień oryginalności przeprowadzonych badań składa się wiele aspektów. Na szczególne podkreślenie (według mojej subiektywnej oceny) zasługuje zbadanie wpływu krzywizny nanorurek na uaktywnienie dynamicznych przejść ze zmianą spinowych i dolinowych stopni swobody, które w prostych i czystych nanorurkach są wzbronione. Doktorantka zastosowała nietrywialne metody teoretyczne zarówno w odniesieniu do oddziaływania spin-orbita jak też uwzględnienia wpływu czasowo-zależnego pola elektrycznego w ramach a) formalizmu równań ruchu dla współczynników rozwinięcia w bazie stanów stacjonarnych oraz b) stosując podejście Floqueta. Samodzielnie opracowała programy numeryczne. Wyniki tych obliczeń zostały opublikowane w czasopismach: Phys. Rev. B (5 prac), J. Phys.: Condens. Matter (2 prace) i w Phys. Rev. X (1 praca). We wszystkich publikacjach pani mgr inż. Osika jest pierwszym autorem, co świadczy o Jej zasadniczym wkładzie. Doktorantka uzyskała środki finansowe z Narodowego Centrum Nauki w ramach grantu Etiuda, co umożliwiło Jej półroczny staż w Instytucie Nauk Fotonicznych w Barcelonie (Hiszpania), gdzie współpracowała ze znakomitymi naukowcami. Wymiernym tego efektem jest obszerny artykuł o podejściu Wanniera-Blocha do opisu generowania wyższych harmonicznych w ciałach stałych, który ukazał się w Physical Review X (*impact factor* 12,789). Doktorantka aktywnie uczestniczyła w międzynarodowych konferencjach specjalistycznych (przedstawiając 10 prezentacji plakatowych i 1 wykład) oraz krajowych seminariach (gdzie wygłosiła 2 referaty). **Taki dorobek badawczy znacznie wykracza poza zwykłe kryteria wymagane do uzyskania doktoratu, dlatego z całym przekonaniem wnioskuję o wyróżnienie Jej pracy doktorskiej.**

Tadeusz Domański

