

dr hab. Mariusz Krawiec, prof. UMCS
Zakład Fizyki Powierzchni i Nanostruktur
Instytut Fizyki
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej
pl. M. Curie-Skłodowskiej 1
20-031 Lublin

Lublin, 19 listopada 2018

**Recenzja rozprawy doktorskiej pani mgr inż. Elżbiety Strzałki
pt. „Modelowanie obrazowania ładunku uwięzionego w planarnych kropkach
kwantowych z wykorzystaniem mikroskopii bramki skanującej”**

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska pani mgr inż. Elżbiety Strzałki została wykonana na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie pod kierunkiem pana prof. dr. hab. inż. Bartłomieja Szafrana.

Rozprawa liczy 121 stron, z czego 49 stron to reprints czterech publikacji naukowych A.1.-A.4. stanowiących podstawę ubiegania się p. Strzałki o stopień doktora. Wszystkie te publikacje zostały opublikowane w latach 2013-2018 w czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym: Journal of Physics: Condensed Matter (1 praca), Semiconductor Science and Technology (1 praca) i Physica E (2 prace). We wszystkich pracach pani Strzałka jest pierwszym autorem, co wskazuje na istotny wkład doktorantki w ich przygotowanie. Znaczący udział p. Strzałki został także potwierdzony przez stosowne oświadczenia współautorów.

Zestaw publikacji został w rozprawie poprzedzony wstępem, zwięzłą prezentacją przedmiotu badań i stosowanych technik obliczeniowych, obszernym i dogłębnym omówieniem wyników obliczeń zawartych w wymienionych publikacjach, podsumowaniem, bibliografią zawierającą 85 pozycji oraz dorobkiem naukowym. Struktura pracy jest przejrzysta z logicznym podziałem na rozdziały i podrozdziały, co znacznie ułatwia lekturę dysertacji. Sposób doboru źródeł dowodzi należytej staranności właściwej dla prowadzenia badań naukowych. W zasadzie nie mam uwag do strony redakcyjnej. Praca została napisana w sposób przemyślany i bardzo starannie, z dbałością o szczegóły.

Zgodnie z wymogami przepisów Ustawy publikacje wchodzące w zakres rozprawy doktorskiej stanowią zbiór spójny tematycznie. Problematyka rozprawy dotyczy elektrostatycznych kropek kwantowych – przedstawicieli szerszej klasy niskowymiarowych zamkniętych nanostruktur półprzewodnikowych, w których realizowane jest zjawisko blokady kulombowskiej. Obiekty takie charakteryzują się rozmiarami porównywalnymi ze średnią drogą swobodną elektronów, co powoduje ograniczenie ruchu elektronów we wszystkich trzech kierunkach przestrzennych, a w konsekwencji prowadzi do dyskretnego widma energetycznego elektronów. Stąd też czasami struktury te określane są mianem sztucznych atomów. W przeciwieństwie do naturalnie występujących atomów, właściwości

sztucznych obiektów z powodzeniem mogą być modyfikowane i kontrolowane poprzez zmianę ich wielkości, kształtu, czy innych zewnętrznych czynników, jak pole elektryczne, czy magnetyczne. Z tych powodów kropki kwantowe znajdują szerokie zastosowanie w nanoelektronice, spintronice, czy optoelektronice. Pod tym względem problematyka rozprawy jest aktualna i ważna.

Praca dotyczy badań teoretycznych właściwości elektronowych elektrostatycznych kropek kwantowych. Obiekty takie wytwarzane są z wykorzystaniem dwuwymiarowego gazu elektronowego powstałego w heterostrukturach półprzewodnikowych, a ich właściwości strukturalne i elektronowe definiowane są poprzez zastosowanie dodatkowych elektrod na powierzchni heterostruktury. W szczególności można sterować przepływem prądu jednoelektronowego wykorzystując przy tym zjawisko blokady kulombowskiej. W doświadczeniach transportowych stosuje się technikę zwaną mikroskopią bramki skanującej. Ideą tej metody jest naładowane ostrze mikroskopu sił atomowych, które może przemieszczać się nad powierzchnią badanego materiału i lokalnie zmieniać potencjał elektrostatyczny odczuwany przez dwuwymiarowy gaz elektronowy, modyfikując przy tym charakterystyki transportowe nanostruktury. Wynikami eksperymentów są mapy przewodności nanostruktur w funkcji położenia ostrza. Rozprawa koncentruje się na opisie teoretycznym takich map przewodności.

Rozdział pierwszy to przedstawienie motywacji do prowadzonych badań oraz zwięzłe, jasne i precyzyjne sformułowanie celu pracy. Aby w pełni zrozumieć rezultaty badań eksperymentalnych z wykorzystaniem mikroskopii bramki skanującej niezbędny jest opis teoretyczny. Mnogość zjawisk i złożoność procesów towarzyszących takim pomiarom powoduje, że jedynym skutecznym podejściem od strony teorii jest modelowanie numeryczne. Celem pracy jest opracowanie numerycznego opisu procesów związanych z pomiarami prądu w nanostrukturach zawierających dwuwymiarowy gaz elektronowy z zaburzeniem potencjału elektrostatycznego wywołanym obecnością ostrza mikroskopu skaningowego. W szczególności podjęto próbę odpowiedzi na pytanie, czy z map prądowych możliwe jest odtworzenie informacji o rozkładzie gęstości ładunku w badanych kropkach kwantowych. Podjęto również wysiłek w celu określenia efektywnego potencjału indukowanego przez skanującą sondę. Kolejnym postawionym zadaniem był opis przejść spinowych i orbitalnych indukowanych zmiennym potencjałem ostrza mikroskopu w pojedynczej i podwójnej kropce kwantowej.

W rozdziale drugim przedstawiono najważniejsze informacje wprowadzające do zagadnień poruszanych w rozprawie. Omówiono podstawy mikroskopii blokady kulombowskiej, mikroskopii bramki skanującej oraz mechanizm elektrycznego dipolowego rezonansu spinowego. Przedyskutowano także główne założenia wykorzystanych w pracy metod obliczeniowych – metody oddziaływania konfiguracji oraz teorii funkcjonału gęstości. Dość jasny i klarowny sposób prezentacji powyższych zagadnień bez wątpienia świadczy o doskonałym opanowaniu warsztatu teoretycznego przez doktorantkę. Jeśliby wskazać jakieś uwagi dotyczące wstępu teoretycznego, to można było pokusić się o krótką wzmiankę dotyczącą ograniczeń metod obliczeniowych oraz wynikających z nich ewentualnych trudności w interpretacji wyników badań.

Rozdział trzeci to omówienie wyników obliczeń zawartych w pracach A.1.-A.4.. Wszystkie cztery publikacje zostały dość szczegółowo przedyskutowane, a wnioski płynące z rozważań mocno i jasno wyartykułowane. Być może pewną niedogodnością, która nasunęła mi się podczas lektury tego rozdziału, jest brak omawianych rysunków. Trzeba ich szukać w odpowiednich publikacjach w załączniku.

Publikacja A.1. poświęcona jest modelowaniu obrazowania gęstości elektronowej w dwuwymiarowych kropkach kwantowych przy wykorzystaniu mikroskopii bramki skanującej. Celem pracy było określenie możliwości uzyskania gęstości ładunku w kropce z energetyki układu kropka-ostrze mikroskopu. Rozkład ładunku w kropce analizowano także w kontekście tworzenia się molekuł Wignera. Rozważano stosunkowo duże kropki kwantowe o różnych kształtach: okrągła, eliptyczna, kwadratowa i kwazijednowymiarowa, a także różne potencjały zaburzające: krótkozasięgowy lorentzowski i dalekozasięgowy kulombowski. Generalnie, dla wszystkich kropek udało się odtworzyć gęstość elektronową w sposób zadowalający, o ile zaburzenie wprowadzone przez ostrze było słabe. Przy wzroście zaburzenia wyniki silnie zależą już od kształtu kropki, liczby elektronów w kropce i charakteru potencjału zaburzającego. Podobnie jest z tworzeniem się molekuł Wignera, które najchętniej tworzą się w przypadku kwazijednowymiarowych kropek kwantowych.

Praca A.2. to kontynuacja tematyki podjętej w publikacji A.1., rozszerzonej jednak o zewnętrzne pole magnetyczne. Obliczenia skupiły się głównie na krystalizacji Wignera w polu magnetycznym. Dla małych kropek w polu magnetycznym uzyskano podobne wyniki jak dla dużych kropek bez pola magnetycznego. Jedynym wyjątkiem było pojawienie się w pewnych warunkach niestabilnych molekuł Wignera, które łatwo zniszczyć niewielką zmianą pola magnetycznego lub wprowadzeniem potencjału zaburzającego ostrza skanującego. Ponadto okazało się, że algorytm stosowany do odwzorowania gęstości elektronowej zawyża lub zaniża obszar zajęty przez gęstość odtworzoną w stosunku do gęstości oryginalnej w zależności od znaku potencjału, tzn. czy jest przyciągający, czy odpychający.

Przedmiotem badań zawartych w artykule A.3. był kształt efektywnego potencjału wytwarzanego przez skanujące ostrze. Zaproponowano algorytm obliczeniowy bazujący na teorii funkcjonu gęstości, uwzględniając przy tym nie tylko ekranowanie potencjału ostrza przez elektrony kropki, ale także przez elektrony w elektrodach. Okazało się, że efektywny potencjał ostrza (jego wysokość i kształt) silnie zależy od położenia ostrza, a w pewnych warunkach staje się silnie asymetryczny. Warto w tym miejscu podkreślić, że obliczenia stanowiące podstawę tej części dysertacji były dość skomplikowane, czasochłonne i wymagały od doktorantki sporego wyczucia i doświadczenia, aby móc pogodzić duże rozmiary układu i problem samouzgodnienia obliczeń z dostępną infrastrukturą komputerową i akceptowalnym czasem obliczeń.

W pracy A.4. skupiono się na zagadnieniach związanych z elektrycznym dipolowym rezonans spinowym. Analizowano przejścia spinowe w kropkach kwantowych wywołane zewnętrznym zmiennym polem elektrycznym skanującego ostrza. Na podstawie przeprowadzonych obliczeń zauważono silną zależność częstotliwości przejść do stanów wzbudzonych od położenia ostrza. W szczególnych sytuacjach, gdy ostrze znajduje się w środku potencjału, niektóre przejścia stają się zabronione. Bardzo interesującym wynikiem obliczeń jest wskazanie możliwości doświadczalnego określenia symetrii funkcji falowych stanów uczestniczących w przejściach.

W rozdziale czwartym zawarto krótkie i zwięzłe podsumowanie badań wraz z wnioskami z nich płynącymi. Sposób ich prezentacji dowodzi dogłębnego zrozumienia przez doktorantkę poruszanych zagadnień.

Podczas lektury rozprawy nasunęła mi się jedna uwaga. Dotyczy ono efektów rozmiarowych. W eksperymentach wykorzystujących mikroskopię bramki skanującej ostrze porusza się w odległości co najmniej 20 nm. Taka też odległość została przyjęta w omawianych obliczeniach. Pojawia się

pytanie, czy rozmiary badanych układów są wystarczające na tyle, aby wyeliminować efekty brzegowe, pojawiające się zwykle jako oscylacyjne zmiany pewnych wielkości, w szczególności gęstości elektronowej.

W podsumowaniu należy stwierdzić, że tematyka podjęta w rozprawie pani magister Elżbiety Strzałki jest ważna i aktualna, a uzyskane rezultaty stanowią cenne uzupełnienie wiedzy w kontekście eksperymentów z wykorzystaniem mikroskopii bramki skanującej. Chciałbym również podkreślić bardzo spójny charakter przeprowadzonych badań zarówno pod względem tematyki jak i użytych narzędzi teoretycznych. Za osiągnięcie doktorantki należy uznać przeprowadzenie szczegółowej i profesjonalnej analizy zjawisk i procesów występujących w badaniach nanoobjektów z wykorzystaniem mikroskopii bramki skanującej. Możliwe to było dzięki opanowaniu zaawansowanych metod obliczeniowych i sporej biegłości w implementacji numerycznej. Na uwagę zasługuje także wysiłek włożony w możliwie wierny opis rzeczywistych układów poprzez dobór odpowiednich i realistycznych parametrów w symulacjach numerycznych.

Nie mam najmniejszych wątpliwości, że wyniki uzyskane w trakcie realizacji doktoratu istotnie poszerzają nasze zrozumienie rezultatów badań z wykorzystaniem mikroskopii bramki skanującej. Recenzowana rozprawa spełnia wszystkie zwyczajowe i ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i z pełnym przekonaniem wnoszę o dopuszczenie pani magister Elżbiety Strzałki do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Mariusz Krawiec