

Kraków, 17 stycznia 2025

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Ananda Manaparambila:
“Nonequilibrium transport and Kondo correlations
in nanoscale systems”**

Recenzowana rozprawa doktorska została wykonana w Instytucie Spintroniki i Informatyki Kwantowej na Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, a jej promotorem jest prof. dr hab. Ireneusz Weymann. Rozprawa liczy 155 stron, podzielona jest na 9 rozdziałów oraz dwa dodatki, zawierające wykaz osiągnięć naukowych Doktoranta (*Dodatek A*) oraz oświadczenia współautorów artykułów wchodzących w skład rozprawy (*Dodatek B*); całość poprzedza spis treści, licząca sześć pozycji lista artykułów wchodzących w skład recenzowanej rozprawy doktorskiej, oraz streszczenie w języku angielskim. Pierwsze cztery rozdziały zawierają zwięzły opis celu pracy oraz krótkie omówienia rozważanych zagadnień szczegółowych i zastosowanych metod obliczeniowych, kolejne dwa to podsumowania otrzymanych wyników w językach angielskim i polskim. Łącznie, pierwsza część rozprawy, stanowiąca przewodnik po publikacjach, liczy 39 stron, i uzupełniona jest liczącym 100 pozycji spisem literatury cytowanej. Zasadniczą część (łącznie 91 stron) stanowi wspomniane 6 artykułów, w większości opublikowanych w renomowanych czasopismach naukowych w latach 2021–24 (*Scientific Reports* — 1 praca, *Physical Review B* — 3 prace, 1 preprint upubliczniony w repozytorium *ArXiv*), których Doktorant jest pierwszym autorem, zaś według załączonych oświadczeń współautorów: Jego wkład był wiodący, a polegał na wykonaniu zasadniczej części obliczeń numerycznych, interpretacji wyników, i aktywnym uczestnictwie we wszystkich etapach powstawania tekstu publikacji. Artykuły

(oznaczone literami A–F) zostały pogrupowane tematycznie w 3 rozdziały, zawierające od 1 do 3 publikacji źródłowych.

Tematem wiodącym opisanych w rozprawie badań teoretycznych są zjawiska transportu ładunku elektrycznego i energii cieplnej, w tym także zjawisko termoelektryczne, w układzie złożonym z elektrod metalicznych, które można traktować w przybliżeniu jako makroskopowe rezerwuary zawierające gaz doskonały Fermiego w lokalnej równowadze termodynamicznej (każda elektroda charakteryzowana jest przez siebie właściwy potencjał chemiczny i temperaturę; w przypadku elektrod magnetycznych dodatkowo gęstość stanów zależy od spinu), a które połączone są za pośrednictwem jednopoziomowej kropki kwantowej, charakteryzowanej przez energią atomową (ϵ_d) oraz oddziaływanie elektron–elektron typu Hubbarda (U). Dla uproszczenia analizy, sprzężenie kropki z elektrodami jest albo idealnie symetryczne (tak jest w pracach A, B i C) albo silnie asymetryczne, co z kolei pozwala traktować wpływ jednej z elektrod jako zaburzenie (prace D, E i F). Zasadniczo, rozważany problem jest matematycznie równoważny modelowi domieszki Andersona, znanemu w literaturze od wczesnych lat 60–tych XX wieku, warto jednak podkreślić, że rozprawa (poza artykułem A, który dotyczy obszaru liniowej odpowiedzi) koncentruje się na procesach głęboko nierównowagowych, kiedy różnica potencjałów chemicznych w elektrodach jest znaczna i zawodzą standardowe metody obliczeniowe dla układów wielociałowych, jak tzw. numeryczna grupa renormalizacji (ang. *numerical renormalization group*, NRG) opracowana przez Wilsona w latach 70–tych, czy też późniejsza o ćwierć wieku tzw. grupa renormalizacji macierzy gęstości (ang. *density matrix renormalization group*, DMRG) autorstwa White’a [na marginesie nadmienimy, że stosowane w obu metodach transformacje w istocie tworzą *półgrupy*, gdyż są nieodwracalne; naturalnie z przyjętą od dziesięcioleci terminologią dyskutować niepodobna]. W takiej sytuacji, konieczne było zastosowanie metody hybrydowej, łączącej NRG z zależną od czasu wersją DMRG (nazywaną dalej tDMRG), która została opracowana zaledwie kilka lat temu (*patrz*: Schwarz, Weymann i in., *Phys. Rev. Lett.* 2018).

Zagadnienia szczegółowe, rozważane w kolejnych artykułach włączonych do rozprawy, wyglądają następująco:

W pracy A (*Scientific Reports*, 2021) badano przewodnictwo elektryczne, termosilę, oraz przewodnictwo cieplne (a ściśle mówiąc: jego część elektronową) jednopoziomowej kropki kwantowej połączonej symetrycznie z elektrodami, wykazującej dodatkowe sprzężenie typu Heisenberga ze zlokalizowanym spinem $S = 1$,

w obszarze liniowej odpowiedzi. Przy założeniu równoległego namagnesowania elektrod, analizowano w szczególności spinowy efekt Seebecka, w obecności którego możliwe wydaje się precyzyjne sterowanie prądem spolaryzowanym spinowo w obecności gradientu temperatury.

W pracach B i C przedstawiono wyniki numeryczne dotyczące (odpowiednio) przewodnictwa i termosily dla kropki kwantowej, ponownie połączonej symetrycznie z elektrodami ferromagnetycznymi, tym razem jednak w sytuacji nierównowagowej. Ważnym wynikiem pracy B wydaje się prawo skalowania (w formie krzywej rezonansowej) opisujące zależność przewodnictwa w granicy małej różnicy potencjałów jako funkcji stosunku lokalnego pola magnetycznego (które wprowadza rozszczepienie Zeemana poziomów kropki) do tzw. efektywnego pola wymiennego, które z kolei jest funkcją polaryzacji magnetycznej elektrody. Zależność pozwala w szczególności porównywać wyniki otrzymane w ramach metody NRG-tDMRG dla małych napięć z wynikami podejścia NRG dla granicy liniowej odpowiedzi, a zatem — z jednej strony weryfikować nową metodę, z drugiej zaś szacować rolę efektów nierównowagowych. Dalej, w pracy C wykazano w szczególności obecność tzw. *koła Kondo* na wykresie zależności indukowanego termicznie prądu od temperatur lewej i prawej elektrody; zmiana znaku prądu wskazuje granicę obszaru, w którym układ (opisany modelem domieszki Andersona) wykazuje korelacje typu Kondo.

Prace D–F koncentrują się na innej sytuacji fizycznej, z którą możemy mieć do czynienia, gdy adatom lub molekula zaadsorbowana przez powierzchnię metalu lub półprzewodnika badana jest z użyciem igły skaningowego mikroskopu tunelowego. Naturalne jest wówczas założenie, że sprzężenie molekula–igła jest zdecydowanie słabsze niż molekula–powierzchnia, co pozwala na uproszczenia rachunków poprzez przyjęcie, że wpływ igły na stan układu powierzchnia–molekula jest perturbacyjny. Praca D poświęcona jest w przeważającej części zagadnieniu wydajności opisanego układu jako generatora termoelektrycznego i przedstawia oszacowanie, w myśl którego rozważany układ może osiągać do 80 procent wydajności idealnego silnika cieplnego działającego przy założonych temperaturach rezerwuarów. W pracy E rozważano zależny od spinu efekt termoelektryczny, zaś w pracy F pokazano, że w konfiguracji z elektrodami magnetycznymi może zachodzić zjawisko kolosalnego magnetooporu, indukowane różnicą temperatur pomiędzy elektrodami.

Pomimo szeregu koniecznych założeń upraszczających należy uznać, że w opisanych badaniach uchwycono istotę zjawisk nierównowagowych towarzyszących transportowi w układach nanoskopowych z korelacjami elektronowymi, a zastosowane

metody obliczeniowe pozwalają (*a priori*) osiągnąć dowolną dokładność wyznaczenia wielkości mierzalnych; przedstawiony cykl artykułów bez wątpienia wpisuje się w światowy nurt badań nad układami kwantowymi o potencjalnych zastosowaniach w elektronice, spintronice i dziedzinach pokrewnych.

Oceniając przedłożoną rozprawę warto zaznaczyć, że część wprowadzająca (w szczególności, liczące 30 stron rozdziały 1.–4.) jest napisana jasno i zrozumiale, zawiera zwięzły wykład dotyczący związków modelu Andersona z modelem Kondo, opis techniki NRG i metod pokrewnych, wraz z modyfikacjami zastosowanymi w pracach włączonych do rozprawy, prezentuje także dobrze dobrane przykłady oryginalnych wyników z prac Doktoranta. Wartościowe są komentarze na temat metod obliczania wielkości mierzalnych dla układów mezo- lub nanoskopowych, w szczególności uwaga o związku wzoru Meira-Wingreena z dobrze znanym wzorem Landauera–Büttikera (s.8).

W omawianej części znalazłem tylko jedną nieścisłość merytoryczną: w metodzie DMRG dla układów w stanie równowagi do kolejnej iteracji brane są wektory odpowiadające najwyższym wartościom własnym zredukowanej macierzy gęstości — stąd nazwa metody — nie zaś najniższym energiom hamiltonianu podukładu, patrz s. 23. Nieco dalej, wyprowadzenie równania 4.11 z r. 4.10 (s. 24) wymaga, aby kolejne hamiltoniany ($H_{n-1,n}$, $H_{n,n+1}$) komutowały, co nie jest oczywiste.

Drobne uchybienia natury edytorskiej nie utrudniają znacząco lektury pracy (w kilku miejscach brakuje wzmianki, że sprzężenie kropki z elektrodami jest symetryczne — zob. np. wzór 2.2 na s.6 — i konieczne jest sięganie do prac źródłowych; w *Podsumowaniu* wskazane byłoby zwięzłe wyliczenia nowych wyników fizycznych, które udało się otrzymać dzięki metodzie NRG–tDMRM). Dla kompletności wprowadzenia, przydałby się także opis układu i procedury pomiarowej, pozwalającej wykrywać spinowy efekt Seebecka.

Podczas lektury nasunęła mi się lista zagadnień, z których — jak przypuszczam — przynajmniej część może uda się przedyskutować rozszerzając analizę już zgromadzonych danych, tj. bez wykonywania nowych symulacji:

— W sytuacji, gdy obliczono zarówno przewodnictwo elektryczne jak również elektronową część przewodnictwa cieplnego (np. w pracy C) wartołoby wyznaczyć także *liczbę Lorentza* i sprawdzić, czy istnieje zakres parametrów układu, w którym prawo Wiedemanna–Franza dla gazu Fermiego jest w przybliżeniu

spełnione? Być może — w analogii do *koła Kondo* — granice obszarów o zawyżonej/zanizowanej liczbie Lorentza będzie można utożsamić z różnymi reżimami modelu?

- W nawiązaniu do pracy B, w której namagnesowanie elektrod jest równoległe, zaś przewodnictwo (w granicy $V \rightarrow 0$) osiąga maksimum gdy lokalne pole magnetyczne w kropce jest dopasowane do efektywnego pola wymiany, nasuwa się pytanie, jak mogłaby wyglądać sytuacja dla niekolinearnego namagnesowania elektrod? Czy możliwe jest zachowanie analogiczne do układu trzech polaryzatorów liniowych (z których dwa skrajne ustawiamy prostopadle)?
- Analiza wydajności układu termoelektrycznego (praca D) prowadzona jest przy założeniu, że nie-elektronowe kanały przewodnictwa cieplnego można zaniedbać. Chociaż dokładne policzenie fononowej części przewodnictwa cieplnego (lub strat energii na promieniowanie) wymagałoby dość arbitralnych założeń co do geometrii układu wydaje się, że oszacowanie przynajmniej rzędu wielkości takich strat (przy założeniu realistycznych rozmiarów i temperatur) nie powinno być trudne.

Przypuszczam, że przygotowanie pełnych odpowiedzi na niektóre z powyższych punktów może okazać się pracochłonne; na publicznej oczekuję zatem raczej krótkich komentarzy do zarysowanych problemów, w szczególności — czy Doktorant uważa je za rozwiązywalne w ramach poznanych metod numerycznych?

Podsumowując, lektura doktoratu sprawiła mi sporą przyjemność, uważam także, że oceniany tekst dowodzi głębokiego zrozumienia poruszonych zagadnień fizycznych, a przy tym wpisuje się w ważny kierunek badań współczesnej fizyki materii skondensowanej. Jestem przekonany, że **przedłożona mi do oceny rozprawa spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane pracom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów postępowania doktorskiego.**

Prof. Adam Rycerz