UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

INSTYTUT FIZYKI IM. MARIANA SMOLUCHOWSKIEGO
Zakład Teorii Materii Materii Skondensowanej i Nanofizyki

dr hab. Adam Rycerz

E-mail: rycerz@th.uj.edu.pl
WWW: http://th.if.uj.edu.pl/~adamr/

Kraków, 25 kwietnia 2019

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Anny Płomińskiej pt. "Spin effects in electron transport through tunnel junctions with embedded magnetic molecules"

Recenzowana rozprawa doktorska została wykonana w Zakładzie Fizyki Mezoskopowej Instytutu Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, promotorem był dr hab. Ireneusz Weymann, zaś promotorem pomocniczym dr hab. Maciej Misiorny. Rozprawa ma formę zbioru 7 artykułów naukowych [A1—A7], opublikowanych w latach 2015–2018 w renomowanych czasopismach fizycznych: *Physical Review B* (4 prace), *IEEE Transaction on Magnetics* (1 praca), *Acta Physica Polonica A* (1 praca), oraz *Europhysics Letters* (1 praca). We wszystkich przypadkach, doktorantka jest pierwszym autorem artykułu, a jej wkład pracy (według załączonych oświadczeń współautorów) miał charakter wiodący. Rozprawę uzupełnia *Abstract* oraz rozdziały wprowadzające (*Introduction*, *Aspects of Methodology*, a także *Summary* w języku angielskim i polskim) o łącznej objętości 32 stron.

Przedmiotem badań teoretycznych opisanych w rozprawie były zjawiska fizyczne zachodzące w układach zawierających molekuły, których momenty magnetyczne są sprzężone ze spinem elektronu zlokalizowanego na orbitalu molekularnym, a transport ładunku elektrycznego zachodzi poprzez tunelowanie ze stanu zlokalizowanego do elektrod ferromagnetycznych. W układach obecne były oddziaływania elektronów zlokalizowanych oraz anizotropia magnetyczna. Rozważania — w większości przypadków — dotyczyły sytuacji, w których sprzężenie pomiędzy molekułą a elektrodami zewnętrznymi było słabe (obszary tzw. *blokady kulombowskiej* oraz *spinowej blokady Pauliego*), co umożliwiało prowadzenie obliczeń z użyciem technik diagramowych; w kilku przypadkach (prace [A4] i [A5]) wspomniane

sprzężenie było silne (rozważano m.in. obszar tzw. *rezonansu Kondo*), a w obliczeniach zastosowano metodę numerycznej grupy renormalizacji zaimplementowaną w pakiecie `Flexible DM-NRG` (którego współtwórcą jest promotor rozprawy, dr hab. Ireneusz Weymann). Widzimy zatem, że doktorantka opanowała szerokie spektrum zaawansowanych metod obliczeniowych stosowanych we współczesnej fizyce nanoskopowych układów otwartych, w tym także układów wykazujących silne korelacje elektronowe i magnetyzm.

W dalszej części recenzji, omówię pokrótce główne zagadnienia badawcze prezentowane w pracach [A1—A7] tworzących recenzowaną rozprawę.

Dwie pierwsze prace [A1, A2] dotyczą zachowania przewodnictwa (i magnetoprzewodnictwa) dwupoziomowej kropki kwantowej utworzonej ze skończonego odcinka nanorurki węglowej, na powierzchni której umieszczono molekułę o dużym momencie magnetycznym, przy zmianach namagnesowania elektrod, rozszczepienia energetycznego poziomów kropki kwantowej, zewnętrznego pola magnetycznego i innych parametrów charakteryzujących układ. Wykazano m.in., że wielkość rozszczepienia energetycznego poziomów znacząco wpływa na magnetoopór układu, co udało się powiązać ze zjawiskiem akumulacji spinowej występującym dla antyrównoległej magnetyzacji elektrod zewnętrznych.

W kolejnej pracy [A3] badano zjawisko spinowej blokady Pauliego w układzie dwóch molekuł magnetycznych połączonych szeregowo z elektrodami ferromagnetycznymi. Pokazano w szczególności, że dla odpowiednio dobranej różnicy energii poziomów molekularnych prąd płynący przez układ jest silnie tłumiony, czemu towarzyszą silne fluktuacje prądu w czasie (tzw. *szum super-poissonowski*).

Pozostałe cztery prace [A4—A7] poświęcono zjawiskom towarzyszącym transportowi ładunku elektrycznego przez jednopoziomową molekułę magnetyczną podłączoną do elektrod, oddzielnie dla przypadków słabego i silnego sprzężenia z elektrodami. W przypadku słabego sprzężenia, analizowano mechanizm dynamicznego przełączania (tj. zmiany orientacji) momentu magnetycznego molekuły pod wpływem prądu spolaryzowanego spinowo, jak również zjawisko histerezy magnetycznej towarzyszące przełączaniu. W przypadku silnego sprzężenia, tj. kiedy pojawia się efekt Kondo w wersji dla kropek kwantowych, rachunki wychodzące od wzoru Kubo pozwoliły przedyskutować zależność przewodnictwa dynamicznego układu od szeregu parametrów charakteryzujących układ, takich jak zewnętrzne pole magnetyczne, anizotropia magnetyczna molekuły, czy też charakter oddziaływania

momentu magnetycznego molekuły ze spinem zlokalizowanego elektronu (które może być ferromagnetyczne lub antyferromagnetyczne). Szczególnie interesujące okazuje się zachowanie układu w przypadku oddziaływania ferromagnetycznego, dla którego występuje tzw. *dwuetapowy efekt Kondo,* ujawniający się w widmie przewodnictwa dynamicznego jako funkcji częstości sygnału.

Przystępując do oceny przedstawionej rozprawy, warto zwrócić uwagę na imponujący dorobek naukowy doktorantki, na który składa się łącznie 10 artykułów opublikowanych w przeważającej mierze w znakomitych czasopismach fizycznych, a doktorantka jest pierwszym autorem każdego z tych artykułów; w przypadku siedmiu artykułów stanowiących rozprawę oświadczenia współautorów nie pozostawiają wątpliwości, że wkład pracy autorki rozprawy miał charakter wiodący. Szereg wyników teoretycznych, w szczególności dotyczących możliwości efektywnego sterowania stanem kwantowym molekuły magnetycznej za pomocą zewnętrznych prądów i pól magnetycznych, ma potencjalnie duże znaczenia dla rozwoju nowej gałęzi tzw. elektroniki molekularnej. Koncentracja uwagi na molekułach o wysokim spinie wydaje się właściwa, gdyż obiekty takie wykazują istotnie dłuższe czasy koherencji kwantowej niż pojedyncze spiny 1/2, co stwarza obiecujące podstawy fizyczne dla przetwarzanie informacji kwantowej i realizacji obliczeń kwantowych w układach z obszaru fizyki materii skondensowanej.

Poniżej, zebrałem nieliczne uwagi krytyczne, które nasuwają się podczas lektury przedłożonej mi do oceny rozprawy.

- W pierwszym z rozdziałów wprowadzających, diagramy na rysunku I.2 (s.10) prawdopodobnie nie przedstawiają gęstości stanów, lecz gęstość nośników ładunku (tj. gęstość stanów pomnożoną przez funkcję rozkładu Fermiego-Diraca).

- W opisie zjawiska *blokady spinowej Pauliego* w układzie podwójnej kropki kwantowej (§2.3.2) zdecydowanie brakuje przejrzystego schematu poziomów energetycznych (i ich obsadzeń), który ilustrowałby mechanizm blokowania przepływu ładunku elektrycznego.

- W rozdziałach wprowadzających szereg ważnych faktów szczegółowych podano bez właściwego osadzenie w kanonie fizyki, rozumianym jako zestaw elementarnych wiadomości wykładanych na różnych poziomach kształcenia uniwersyteckiego. Przykładowo, szerokość rezonansu (Γ) wynika wprost z tzw.

złotej reguły Fermiego; w kilku miejscach pojawia się także funkcja rozkładu Fermiego-Diraca bez podania nazwy i wyjaśnienia kontekstu fizycznego.

- Wydaje się także, że rozdziały wprowadzające wiele zyskałyby na przejrzystości, gdyby zawarto w nich nieco obszeniejszy opis stanu wiedzy przed rozpoczęciem badań szczegółowych opisanych w pracach stanowiących rozprawę. W szczególności, wskazany byłby bardziej rozbudowany opis aktualnego stanu badań doświadczalnych układów podobnych do rozważanych w rozprawie.

Pragnę podkreślić, że wskazane wyżej drobne uchybienia zostały wymienione wyłącznie z poczucia obowiązku recenzenta i w żadnym stopniu nie umniejszają wartości rozprawy, o której stanowi liczba i ranga oryginalnych wyników fizycznych opisanych wcześniej w tej recenzji.

W podsumowaniu, uważam, że przedstawiona mi do oceny praca spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie mgr Anny Płomińskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Adam Rycerz