UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

INSTYTUT FIZYKI TEORETYCZNEJ
Zakład Teorii Materii Skondensowanej i Nanofizyki

Prof. dr hab. Adam Rycerz

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

Kraków, 15 lutego 2022

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Michała Świderskiego pt.
"Atomistic theory of excitonic fine structure in InAs/InP nanowire quantum dot molecules"

Praca doktorska Pana mgr. Michała Świderskiego została wykonana w Katedrze Mechaniki Kwantowej Instytutu Fizyki Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu, a promotorem pracy jest dr hab. Michał Zieliński, prof. UMK. Recenzowana rozprawa ma formę monotematycznego cyklu czterech artykułów w czasopismach recenzowanych, z których jeden ukazał się w czasopiśmie *Acta Physica Polonica A* w 2016 roku, zaś pozostałe trzy prace w *Physical Review B* w latach 2017–21. We wszystkich przypadkach prace są dwuautorskie, doktorant jest pierwszym autorem, zaś promotor drugim. Dołączone do rozprawy oświadczenie promotora nie pozostawia wątpliwości, że wkład pracy doktoranta był we wszystkich przypadkach istotny, a polegał na samodzielnym wykonaniu wszystkich kluczowych obliczeń numerycznych i zasadniczej części analizy wyników.

Do pracy dołączono liczący 48 stron i napisany w języku angielskim przewodnik po publikacjach, który podzielony jest na trzy rozdziały [Wprowadzenie, Dyskusja głównych wyników, Podsumowanie publikacji i wnioski – *tłum. AR*], uzupełniony spisem literatury (115 pozycji), a poprzedzony streszczeniami w języku angielskim i polskim, jak również spisem treści.

Tematem przewodnim badań opisanych w pracy jest struktura widmowa ekscytonów wzbudzanych w układzie podwójnej kropki kwantowej, uformowanej w nanodrucie z arsenku indu otoczonego arsenkiem fosforu (a w przypadku pierwszej z prac – arsenkiem galu). Opisany układ poddawany jest działaniu pól zewnętrznych,

generowanych poprzez efekt piezoelektryczny lub za pomocą zewnętrznym elektrod (tzw. bramek). W kolejnych pracach rozważane są najróżniejsze warianty opisanego zagadnienia; układ dwóch kropek występuje w szczególności w wersji symetrycznej (identyczne kropki kwantowe) lub asymetrycznej (jedna z kropek, o kształcie dysku, jest wyższa od drugiej), zmieniana jest orientacja krystalograficzna drutu względem struktury kryształu InP ([001] lub [111]), część atomów indu wewnątrz kropek jest też zastępowana fosforem, tworząc stop $InAs_xP_{1-x}$ charakteryzujący się losowym przestrzennym rozmieszczeniem atomów fosforu.

Od strony metodologicznej, kolejne prace adaptują schemat obliczeniowy przedstawiony w pierwszej pracy [*APPA*, 2016] w ramach którego hamiltonian ciasnego wiązania o wymiarze około 10^7 (dla układu zawierającego około 10^6 atomów) jest jednokrotnie diagonalizowany metodą iteracyjną (mamy bowiem do czynienia z macierzą rzadką), prowadzącą do wyznaczenia kilku najniższych poziomów elektronowych i kilku najwyższych – dziurowych, następnie zaś otrzymane (typowo) 10 stanów (20 po uwzględnieniu spinu) stanowi bazę przestrzeni Hilberta, w której dokonuje się diagonalizacja hamiltonianu z zaburzeniem (którym jest jeden z czynników wymienionych wyżej). Ze względu na ograniczony wymiar "obciętej" przestrzeni Hilberta, możliwa jest efektywna dyskusja stanów wielocząstkowych w ramach metody konfiguracji oddziaływania, jak również dogłębna analiza ewolucji własności układu ze zmieniającymi się parametrami opisującymi zaburzenia.

Za najważniejsze wyniki artykułów wchodzących w skład recenzowanej rozprawy należy uznać:

(i) oszacowanie wartości liniowych i kwadratowych wkładów piezoelektrycznych od energii poziomów w podwójnej kropce InAs/GaAs w ramach diagonalizacji pełnego hamitonianu ciasnego wiązania oraz tzw. ścisłej diagonalizacji hamiltonianu obciętego;

(ii) dyskusję numeryczną ewolucji poziomów tzw. ciemnego i jasnego ekscytonu (intensywność spektralna determinowana jest wartością elementów macierzowych dla przejść elekrycznych dipolowych) jako funkcji odległości pomiędzy kropkami kwantowymi;

(iii) analogiczną dyskusję zachowania poziomów ekscytonowych pod wpływem zmian pola elektrycznego przyłożonego wzdłuż osi głównej układu;

(iv) analizę wpływu nieporządku stopowego na dyskutowane wcześniej własności, oraz identyfikację, które spośród wyników należy uznać za odporne na taki nieporządek, które zaś nie.

Przystępując do oceny przedłożonej rozprawy należy wskazać, że ilość i ranga przedstawionych publikacji naukowych doktoranta, jak również jego wkład w ich wykonanie, pozwalają zdecydowanie stwierdzić, iż mamy do czynienia z dorobkiem ponadprzeciętnym dla osoby ubiegającej się o stopień doktora nauk fizycznych. Pan mgr Świderski bez wątpienia opanował szereg zaawansowanych technik obliczeniowych z obszaru fizyki teoretycznej materii skondensowanej, a ponadto wykazał się sporą dociekliwością w badaniu interesującego układu fizycznego o sporym potencjale aplikacyjnym; podwójne kropki kwantowe, z możliwością przełączania pomiędzy stanami tzw. *ciemnego* (tj. słabo oddziałującego z polem promieniowania elektromagnetycznego) i *jasnego* (silniej oddziałującego z tymże polem) *ekscytonu* stanowią bowiem obiecującą platformę do budowy nowych "stałociałowych" wersji kubitów – jednostek informacji kwantowej.

Chociaż analiza zagadnień szczegółowych, przedstawiona w czterech pracach stanowiących omawianą rozprawę, jest bez wątpienia dogłębna, **nie sposób uciec kilku pytań, które nie zostały przez autora wprost postawione**.

W szczególności, obcięcie przestrzeni Hilberta do przestrzeni liniowej rozpiętej na kilku zaledwie stanach własnych hamiltonianu niezaburzonego generuje typowy dla takich problemów schemat wariacyjny, wydaje się zatem wskazane systematyczne szacowanie niepewności przybliżenia dla wszystkich rozważanych przypadków, czy do poprzez porównanie wyników dla różnych rozmiarów bazy, czy też wykonanie dalszych iteracji w ramach schematu Lanczosa–Kryłowa dla przyjętego rozmiaru bazy.

Ponadto, sześć losowych realizacji nieporządku stopowego [patrz *PRB*, 2021] to zbyt mało dla sformułowania wniosków natury statystycznej – które z otrzymanych obrazów struktury subtelnej ekscytonów mają charakter typowy, a które nietypowy? Jestem przekonany, że sformułowane takich wniosków (a prawdopodobnie także porównanie z wynikami teorii macierzy przypadkowych) byłoby możliwe już przy *kilkuset* realizacjach układu, nie jest to zatem zadanie niemożliwe do wykonania przy współczesnej dostępności czasu obliczeniowego na superkomputerach.

Rozważane zagadnienia są tematycznie bliskie pracom opublikowanym około 10 lat temu przez M. Nowaka i B. Szafrana. Chociaż wspomniani autorzy nie analizowali wprost widm ekscytonowych, rozważane układy (podwójne kropki kwantowe w InAs) są niemal identyczne, dziwi zatem, że wśród pozycji bibliograficznych brak odwołań do tych znakomitych prac.

W końcowej części recenzji zmuszony jestem zawrzeć kilka uwag krytycznych dotyczących jakości przedłożonych mi do oceny materiałów.

Niestety, poprzedzające cykl prac stanowiących rozprawę trzy rozdziały wprowadzające, które nazwę roboczo *przewodnikiem po pracach*, zostały najprawdopodobniej napisane w pośpiechu i nie mogą pełnić swojej roli. Obok drobiazgów w postaci błędów edytorskich (opuszczone lub powtórzone słowa w niektórych zdaniach, brak pozycji *"Bibliography – p. 40"* w spisie treści), *Przewodnikowi* doskwiera znaczna koncentracja żargonu technicznego. Zdanie w formie: *"The effect of alloying on the electron spectra leads […] to the blueshift of the electron energies"* (s. 23) zdecydowanie nie jest zrozumiałe osoby, która nie przeczyta pracy źródłowej. Pomiędzy rysunkami 2.16(b) i 2.17 mamy kolizję oznaczeń osi rzędnych, przydałoby się także objaśnienie, co dokładnie oznacza zapis *"The energies are plotted relative to the central energy of each branch […]"* ? Dalej, podpis Rys. 2.21 sugeruje, że rysunek powinien składać się z trzech wierszy paneli z wykresami, podczas gdy zawiera jedynie dwa wiersze. W sekcjach 2.2 oraz 2.3.4 znajdujemy także odwołania do "Appendix"–ów, których w materiałach uzupełniających zwyczajnie nie ma [chodzi zapewne o *Appendix* w pracy PRB 2019, a następnie o – jeden z trzech … – *Appendix*–ów pracy PRB 2021].

Niestety, uciążliwa lektura Przewodnika nie umożliwiła mi zrozumienia ani schematu obliczeniowego, który jest za to zupełnie jasno i zwięźle opisany w pracy z *Acta Phys Polon. A*, ani też sposobu obliczania intensywności widmowych, który z kolei jest opisany skrótowo jednej z późniejszych prac – a rolą materiałów dodatkowych dołączanych do doktoratów jest przecież proste omówienia metod i zagadnień opisanych w pracach stanowiących rozprawę. Szczególnie trudno czyta się sekcję 3.3: *"Summary and abstracts of articles comprising the thesis"* – nagromadzenie technicznych haseł literalnie przepisanych z abstraktów przywoływanych prac sprawia, że tekst w niej zawarty jest trudny do zrozumienia bez lektury tychże prac; ta sekcja

powinna zostać gruntownie przepisana, aby mogła pełnić rolę inną niż notatka dla piszącego przypominająca mu, co dopiero *ma zostać napisane* …

W podsumowaniu, pomimo pewnych uwag krytycznych dotyczących – zasadniczo – warstwy edytorskiej materiałów dołączonych do rozprawy, **nie mam najmniejszych wątpliwości, że przedłożona mi do oceny rozprawa doktorska mgr. Michała Świderskiego, pt. *"Atomistic theory of excitonic fine structure in InAs/InP nanowire quantum dot molecules"*, spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane pracom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów postępowania o nadanie stopnia naukowego doktora w zakresie fizyki.**

Prof. Adam Rycerz