

Kraków, 1 sierpnia 2025

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Tanmaya Thakura pt.
“Electron States Confined in Electrostatic Quantum Dots Defined
within Phosphorene”**

Recenzowana rozprawa doktorska została wykonana na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo–Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie, a jej promotorem jest prof. dr hab. Bartłomiej Szafran. Rozprawa liczy 130 stron (w tym 12 numerowanych osobno, a zawierających streszczenia — w językach angielskim i polskim, podziękowania, oraz spis treści i spis ilustracji) i jest podzielona na 10 rozdziałów, z których trzy pierwsze (liczące łącznie 28 stron) zawierają informacje wprowadzające do problemów rozważanych w dalszych częściach rozprawy, rozdział 4. (6 stron) zawiera krótkie omówienia wyników pięciu artykułów naukowych stanowiących zasadniczą część rozprawy; 5 kolejnych rozdziałów (razem 66 stron) to pełnotekstowe odblaski wspomnianych artykułów; całość zamyka jednostronicowe podsumowanie oraz liczący 239 pozycji spis literatury cytowanej w rozdziałach 1.–3. Doktorant jest pierwszym autorem 5 artykułów opublikowanych w latach 2022–24 w dobrych czasopismach naukowych (dwa pierwsze ukazały się w *Physical Review B*, trzy kolejne — w *Scientific Reports*).

Przedmiotem badań opisanych w doktoracie są stany kwantowe jednego lub kilku elektronów uwięzionych w kropce kwantowej (lub układzie kropek) wytworzonej w płatku fosforenu za pomocą zewnętrznych pól elektrostatycznych; w ostatniej z prac badana jest także dynamika stanów kwantowych w obecności oscylującego pola elektrycznego. Fosforen, czyli dwuwymiarowa odmiana czarnego fosforu, to obiecujący materiał w kontekście zastosowań (opto–)elektronicznych, gdyż — w odróżnieniu np.

od grafenu — posiada przerwę energetyczną zmieniającą się w zakresie 1–2 eV, a zatem dopasowaną do energii światła widzialnego i bliskiej podczerwieni; dodatkowo, ruchliwość nośników w fosforenie jest wysoka, zdecydowanie przewyższając inne materiały dwuwymiarowe (za wyjątkiem grafenu) jak dwusiarczki molibdenu czy dwuselenki hafnu. Ważną cechą odróżniającą fosforen od kryształów dwuwymiarowych innych pierwiastków — jak silicen czy stanen — jest trwałość monowarstwy; zaś z punktu widzenia badań podstawowych: stosunkowo wysoka masa efektywna nośników, która sprawia, że rola oddziaływań elektronów jest istotna, co otwiera pole do dyskusji zjawisk takich jak krystalizacja Wignera, ułamkowy kwantowy efekt Halla, czy uporządkowanie magnetyczne.

W pierwszej z prac wchodzących w skład rozprawy badano w szczególności wpływ anizotropii masy efektywnej (która jest około 5 razy większa dla elektronu poruszającego się wzdłuż linii zygzak kryształu fosforenu niż dla kierunku prostopadłego) na możliwość obserwacji efektu Aharonowa–Bohma w pierścieniu zdefiniowanym elektrostatycznie w płatku fosforenowym [zob. *Phys. Rev. B* **105**, 165309 (2022)]. Okazuje się, że eliptyczny kształt pierścienia, dopasowany do asymetrii masy, prowadzi do oscylacji poziomów energetycznych — jako funkcji strumienia magnetycznego — w analogii do oscylacji w układzie izotropowym. Przedmiotem kolejnych dwóch prac jest konfiguracja przestrzenna (w szczególności formowanie molekuł Wignera, które — z uwagi na wspomnianą anizotropię masy efektywnej — może być obserwowane w układzie laboratoryjnym) i spinowa stanu podstawowego układu 1–5 elektronów w kropce umieszczonej w jednorodnym zewnętrznym polu magnetycznym [zob. *Phys. Rev. B* **106**, 205304 (2022)] oraz konfiguracja sieci wirów magnetycznych (tzw. *vortex’ów*) pojawiających się w podobnym układzie w silnych polach [por. *Sci. Rep.* **13**, 9707 (2023)]. W czwartej pracy badano ferromagnetyzm typu Nagaoki w układzie czterech fosforenowych kropek kwantowych [por. *Sci. Rep.* **13**, 18796 (2023)], w piątej zaś ewolucję czasową — a w szczególności przejścia od konfiguracji singletowej do trypletowej — w układzie dwóch elektronów uwięzionych w podwójnej fosforenowej kropce kwantowej poddanej działaniu naprzemiennego pola elektrycznego.

Bez wątplenia przedstawione w pracy badania należą do nowego i ciekawego nurtu fizyki materii skondensowanej, w ramach którego — w kontekście materiałów monowarstwowych — rozważane są ściśle–dwuwymiarowe wersje szeregu efektów fizycznych opisanych nieco wcześniej dla heterostruktur półprzewodnikowych. Warto zwrócić uwagę na znakomicie wybrany moment rozpoczęcia badań: w roku 2021, kiedy

Doktorant rozpoczynał pracę, minęły zaledwie dwa lata od pierwszych doniesień o skonstruowaniu tranzystora polowego na bazie czarnego fosforu, który był stabilny strukturalnie w kontakcie z powietrzem a zarazem wykazywał cechy transportu balistycznego (2019). W literaturze brakowało wówczas opisów kropek kwantowych definiowanych elektrostatycznie w fosforenie (za to szereg prac dotyczyło własności płatków uformowanych z tego materiału). Podobnie, nie istniały doniesienia doświadczalne dotyczące bezpośredniej obserwacji kryształów Wignera w nanostrukturach. Pierwsze prace doświadczalne dotyczące drugiej grupy spośród wymienionych wyżej układów pojawiły się w roku 2024; zaś na realizację elektrostatycznie definiowanych kropek kwantowych w fosforenie przyjdzie zapewne jeszcze nieco poczekać.

Dobrze wybrana, aktualna tematyka badań z pewnością zaowocuje niemałym oddźwiękiem wyników Doktoranta w środowisku badaczy nowych materiałów dwuwymiarowych. Biorąc aktywny udział w opisanych badaniach, Doktorant z pewnością opanował także szereg zaawansowanych technik obliczeniowych z obszaru fizyki nanostruktur. W pracach wchodzących w skład rozprawy mamy bowiem do czynienia między innymi z diagonalizacją hamiltonianu ciasnego wiązania, rozwiązywaniem efektywnego (niezależnego od czasu) równania Schrödingera metodą różnic skończonych, oraz konstrukcją (i optymalizacją) bazy jednocząstkowej używanej następnie do budowy wielocząstkowych wyznaczników Slatera w ramach (okrojonej) metody konfiguracji oddziaływania. Ponadto, w drugiej z prac włączonych do rozprawy rozwiązywane jest równanie Poissona w celu wyznaczenia potencjału elektrostatycznego w obszarze kropki; w ostatniej zaś pracy mamy do czynienia z nieperturbacyjną metodą rozwiązywania zależnego od czasu równania Schrödingera, która umożliwia dyskusję zarówno przejść jedno- jak i wielofotonowych. Jest to bogaty zestaw narzędzi przydatnych w fizyce teoretycznej materii skondensowanej.

Pewne uwagi krytyczne, które nasunęły mi się podczas lektury rozprawy, dotyczą w szczególności faktu, że przedstawione w częściach wprowadzających opisy metod i wyników publikacji Doktoranta są raczej ubogie. Zabrakło mi przykładowo opisu (użytej w pierwszej pracy) metody przesuwania dna pasma przewodnictwa pozwalającej skorygować efekty kwantowania geometrycznego i — w rezultacie — uzgodnić wyniki otrzymane z rachunków w ramach ciasnego wiązania i z hamiltonianu efektywnego. Podobnie, w rozdziałach wprowadzających wartołoby poświęcić więcej miejsca metodom wyboru stanów jednocząstkowych do konstrukcji

wyznaczników Slatera użytych (w pracach 2. i 3.) do budowy wielocząstkowych funkcji falowych, jak również technice wyznaczania potencjału elektrostatycznego w kropce.

Nieco wątpliwości budzi także zastosowana metoda (sztucznej) dyskretyzacji efektywnego równania Schrödingera; pytanie, na które chciałbym otrzymać odpowiedź podczas publicznej obrony, sformułuję następująco:

— *Chociaż niskoenergetyczne poziomy jednocząstkowe, otrzymane w ramach modelu ciasnego wiązania i modelu efektywnego zgadzają się znakomicie, zgodność energii niekoniecznie musi iść w parze ze zgodnością kształtów funkcji falowych. Czy anizotropia obecna w modelu ciasnego wiązania dalej od dna pasma (a częściowo usunięta w modelu efektywnym) może mieć wpływ na symetrie rozwiązań; w szczególności — występowanie lokalizacji typu Wignera wyłącznie dla 2 i 4 elektronów w kropce?*

Z obowiązku recenzenta, wskażę również kilka niedoskonałości typu edytorskiego zauważonych podczas lektury:

- Zawarte w podrozdziale 2.1 (s. 9) uwagi o stanach związanych stosują się — ściśle rzecz ujmując — do układów schrödingerowskich. Choć zasadniczo fosforen (w przybliżeniu masy efektywnej) takim układem jest, w szerszym kontekście układów dwuwymiarowych warto pamiętać chociażby o grafenie, gdzie dirakowska relacja dyspersji sprawia, że mogą istnieć stany zlokalizowane (tj. takie, dla których funkcja falowa zanika wraz z odległością) lecz niezwiązane [zob. np. Pereira i in., *Phys. Rev. Lett.* **99**, 166802 (2007)].
- Na s.14, w zdaniu: “*Wigner crystallization occurs in low density electron systems where the electron electron interaction energy is higher than the Fermi level*” zamiast “Fermi level” lepiej byłoby napisać: “kinetic energy”.
- Na s.16, w opisie ułamkowego kwantowego efektu Halla, symbole a , b występujące we wzorze na współczynnik wypełnienia (ν) zmieniają się w p i q .
- W podrozdziale poświęconym ferromagnetyzmowi Nagaoki, w opisie symulatorów kwantowych realizowanych układach zimnych atomów (s.20), prawdopodobnie chodzi o model Bosego–Hubbarda.
- Dalej, s.21, pojawia się odwołanie do twierdzenia Lieba–Mattisa bez objaśnienia, o czym to twierdzenie mówi.

- W rozdziale 3.1, we wzorze (3.1) w ostatnim wyrazie brakuje pola magnetycznego (B). Ponadto, dwa pierwsze wyrazy po prawej stronie zapisane są w formalizmie II kwantowanie (z użyciem operatorów kreacji i anihilacji, zresztą nieobjaśnionych pod wzorem) ostatni zaś — w I-szym kwantowaniu.
- W rozdziale 3.2., zawierającym krótki opis metody konfiguracji oddziaływania, nieco nielogiczne wydaje się użycie I-szego kwantowania i rozpisywanie wyznaczników, skoro wcześniej przywołano już formalizm II kwantowania.

W podsumowaniu, praca doktorska prezentuje rozwiązania szeregu oryginalnych problemów badawczych, zaś przy jej tworzeniu Doktorant wykazał się znajomością zaawansowanych metod obliczeniowych z obszaru fizyki teoretycznej materii skondensowanej. W moim przekonaniu, **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