

Kraków, 1 czerwca 2015 r.

Prof. dr hab. inż. Janusz Tobała
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademia Górniczo-Hutnicza
Al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków
Email: tobola@ftj.agh.edu.pl; tel: 12 617 44 55

**Ocena dorobku naukowo-dydaktycznego doktora Tomasza Chwieja
oraz rozprawy habilitacyjnej (spójny tematycznie cykl publikacji) pt.:**
*"Analiza elektronowych stanów zlokalizowanych i przewodzących
w półprzewodnikowych pierścieniach kwantowych"*

/postępowanie kwalifikacyjne o nadanie stopnia doktora habilitowanego/

Dr inż. Tomasz Chwiej ukończył studia magisterskie na Wydziale Fizyki i Techniki Jądrowej AGH w Krakowie w 2001 r. i tam też w 2005 r. obronił swoją pracę doktorską pt. *Badania teoretyczne własności sztucznych molekuł i układów ekscytonowych w pojedynczych i sprzężonych kropkach kwantowych*, zrealizowaną pod kierunkiem prof. Stanisława Bednarka. Jak można zauważyć z przebiegu dalszej pracy naukowej, wieloletnia działalność w znakomitym zespole teoretycznym zajmującym się teorią elektronowych nanostruktur półprzewodnikowych (ostatnio również nanourządzeń), w sposób trwały zdominowała tematykę prac dr T. Chwieja, pokazując stosunkowo niewielką ewolucję Jego zainteresowań naukowych. Tak obrana strategia badawcza okazała się jednak dla Habilitanta niezwykle owocna, bo przyniosła kilkanaście artykułów opublikowanych w najlepszych czasopismach fizycznych (wśród nich kilka prac znakomitych), w bądź co bądź młodej dziedzinie jaką jest teoria półprzewodnikowych układów nanofizycznych. Należy też podkreślić, że o ile na etapie doktoratu, T. Chwiej rozważał teoretycznie przede wszystkim kwantowe zachowania elektronów tworzących kwazi-molekuły lub układy ekscytonowe w pojedynczych lub podwójnych kropkach kwantowych, to ostatnie lata przeniosły ciężar zainteresowań Autora zdecydowanie w stronę analizy dynamiki stanów elektronowych oraz transportu ładunku w układach półprzewodnikowych o złożonej geometrii, jakimi są np. pierścienie kwantowe. Wymagało to od Habilitanta sformułowania w miarę realistycznych modeli takich nanostruktur, opracowania nowych algorytmów oraz ich implementacji w postaci dedykowanych pakietów obliczeniowych. A zrozumienie "działania" półprzewodnikowych pierścieni kwantowych okazuje się ważne nie tylko ze względu na głęboki aspekt poznawczy, ale staje się też istotne z uwagi na możliwości zastosowań takich układów w spintronice.

Warto jeszcze podkreślić, że niezwykle dynamiczny rozwój nanotechnologii, czemu towarzyszy rozwijanie i badanie modeli fizycznych w nanoskali, dostarcza nie tylko wyrafinowanych metod uzyskiwania nanostruktur półprzewodnikowych, ale też coraz bardziej zaawansowanych i wiarygodnych technik, po pierwsze obrazowania tych struktur a po drugie

pomiaru wybranych wielkości fizycznych (np. parametrów transportowych) w układach niskowymiarowych. Efektem tej sprzyjającej aury jest między innymi to, że wyniki obliczeń numerycznych (często uzyskiwanych po raz pierwszy dla konkretnych geometrii nanostruktur) mogą być bezpośrednio konfrontowane z oryginalnymi rezultatami eksperymentalnymi. I jak się wydaje, Habilitant dysponuje nie tylko teoretycznymi umiejętnościami, ale przede wszystkim własnymi narzędziami badawczymi umożliwiającymi interpretację zachowań elektronów w takich właśnie nanostrukturach kwantowych. Choć należy pamiętać, z czego autor znakomicie zdaje sobie sprawę krytycznie analizując swoje rezultaty, że modele stosowane w prezentowanych publikacjach mają pewne ograniczenia. Korzystają z formalizmu jednocząstkowego, gdzie opis efektów wielociałowych jest przybliżony dodatkowym potencjałem efektywnym. Ponadto, problem rozwiązania kwantowych równań ruchu elektronów sprowadzony jest do przypadku gazu dwuwymiarowego, co jest zgrabnym i celnym obejściem problemu trójwymiarowego, ale może wzbudzać wątpliwości np. przy modelowaniu transportu w tzw. mikroskopii bramki skanującej. Ponadto, w celu umożliwienia porównań z eksperymentem dla konkretnych nanostruktur, korzysta się z doświadczalnych parametrów materiałowych (np. na bazie pomiarów heterozłącza In-GaAs/GaAs) i geometrycznych, a masy efektywne elektronów i dziur w półprzewodnikach mogą się silnie zmieniać z domieszkowaniem oraz wykazywać anizotropię.

Na podstawie dostarczonej dokumentacji odniosłem wrażenie, że dr T. Chwiej należy do grona bardzo utalentowanych fizyków-teoretyków młodego pokolenia. Jak można przypuszczać wieloletnia i ścisła współpraca z tak znakomitym teoretykiem jakim jest prof. Bartłomiej Szafran (jest on drugim autorem pięciu prac zgłoszonych jako osiągnięcie habilitacyjne dr T. Chwieja) spowodowała, że ta wspólna - można powiedzieć - przygoda naukowa, doprowadziła ten tandem do wyników ważnych, czasem przełomowych. Swoją wysoką opinię o wynikach Habilitanta postaram się uzasadnić, analizując najpierw cykl prac stanowiących podstawę rozprawy habilitacyjnej, a następnie dotychczasowy dorobek naukowo-dydaktyczny dr T. Chwieja (po doktoracie).

Ocena cyklu publikacji pt. *Analiza elektronowych stanów zlokalizowanych i przewodzących w półprzewodnikowych pierścieniach kwantowych*

Podstawą ubiegania się dr T. Chwieja o nadanie stopnia doktora habilitowanego jest cykl sześciu publikacji o charakterze teoretycznym, opublikowanych w latach 2008-2014, które tematycznie koncentrują się wokół specyficznych cech stanów elektronowych (jednego lub kilku elektronów) uwięzionych w pierścieniach o rozmiarach nanometrycznych, w których ujawniają się efekty kwantowe. Wszystkie artykuły zostały opublikowane w czasopismach o dużym zasięgu oddziaływania (*Physical Review B* oraz *Journal of Physics: Condensed Matter*) W pracach tych

badane są różne aspekty zachowań elektronów w nanostrukturach półprzewodnikowych przy następujących założeniach: (i) pojedynczy pierścień jest otwarty lub zamknięty, (ii) posiada on pełną symetrię obrotową, bądź też jest ona zaburzona poprzez obecność defektów w postaci kropek kwantowych. Analizie poddawane są również stany elektronów w obecności zewnętrznych pól takich jak, elektrostatyczny potencjał ostrza (umieszczony ponad pierścieniem), czy też pole magnetyczne prostopadłe do pierścienia. Do innych rozważanych przypadków można zaliczyć układ bocznie sprzężonych pierścieni kwantowych, gdzie analizuje się stany własne jednego, dwóch i trzech elektronów. Warto podkreślić, że wiele aspektów zagadnień poruszanych w pracach dr T. Chwieja wpisuje się w nurt fundamentalnych problemów mechaniki kwantowej, do jakich należy m.in. (i) zagadnienie wpływu postaci potencjałów elektromagnetycznych (skalarne i wektorowe) na fazę funkcji falowej opisującej cząstkę naładowaną przemieszczającą się między znanymi położeniami, ale po różnych trajektoriach; (ii) zagadnienie lokalności czy też nielokalności zachowań funkcji falowej cząstek z uwagi na bliskie sąsiedztwo tych potencjałów, (iii) związek własności topologicznych układu z fazą funkcji falowej, co wiąże się z intensywnie badanymi w ostatnich latach tzw. fazami geometrycznymi. W prezentowanych pracach, szczególną uwagę poświęca się konsekwencjom oddziaływania elektronów z polem magnetycznym, które może prowadzić do modyfikacji całkowitego lub ułamkowego efektu Aharonova-Bohma.

Oświadczenia współautorów nie budzą wątpliwości, że dr T. Chwiej jest nie tylko wiodącym (pierwszy autor artykułów [R1-R6]), ale wręcz dominującym autorem publikacji, które są podstawą rozprawy habilitacyjnej. Prof. B. Szafran pełnił rolę inicjatora lub konsultanta prezentowanych badań teoretycznych nad pierścieniami kwantowymi. Artykuł [R3] jest rozszerzoną wersją wyników uzyskanych w pracy magisterskiej K. Kutorasińskiego (dr T. Chwiej był jej promotorem).

W autoreferacie najważniejsze osiągnięcia zawarte w publikacjach [R1-R6] są prezentowane wg schematu, który trafnie pokazuje czasową ewolucję podjętych badań teoretycznych: (i) pierścienie zamknięte [R1-R2] (2008-2009), (ii) pierścienie otwarte [R3-R4] (2010-2012), (iii) transport w pierścieniu kwantowym z obecnością tzw. bramki skanującej [R5-R6] (2013-2014).

W pracach [R1-R2], w pierścieniach tzw. "czystych" (niezaburzonych) oraz zaburzonych obecnością jednego lub dwóch defektów, obliczane są gęstości prądów (diamagnetyczne i paramagnetyczne) na podstawie prawa Biota-Savarta, rozwijając funkcje falowe w bazie orbitali Gaussa. W wyniku analizy numerycznej przypadku uwięzionych 1, 2 i 3 elektronów w dwuwymiarowej studni kwantowej, Autorzy dochodzą do spektakularnych wniosków: (i) pojawienie się jednoelektronowych wysp ładunku jest ściśle związane z gładkimi maksimami energii stanu podstawowego zależnego od pola magnetycznego (i na odwrót nieciągłości funkcjonału energii stanu podstawowego oznaczają, że tzw. "pinning" gęstości ładunkowych jest

zabroniony) oraz (ii) analiza funkcji potencjału chemicznego w funkcji pola B, pozwala określić charakter zaburzenia pierścienia (co daje się badać eksperymentalnie). Innym intrygującym wynikiem jest stwierdzenie, że w obecności dwóch identycznych kropek kwantowych (symetria zwierciadlana) moment magnetyczny jednego i trzech elektronów zachowuje się tak jak dla pierścienia niezaburzonego. W obecności dwóch bocznie sprzężonych pierścieni, pokazano - analizując zmiany momentu magnetycznego oraz potencjału chemicznego w funkcji pola magnetycznego dla układu 1 lub 2 elektronów - że na tej podstawie można wnioskować o wielkości sprzężenia tunelowego pomiędzy pierścieniami. Ponadto, zauważono, że wystarczy zmienić zewnętrzne pole magnetyczne, aby efektywnie przemieszczać ładunek pomiędzy pierścieniami i odwracać kolejność poziomów energetycznych odpowiadających stanom zlokalizowanym.

W pracach [R3-R4] rozważana jest propagacja pojedynczego oraz kilku elektronów (rozwiązując zależne od czasu równanie Schrodingera) w otwartych pierścieniach kwantowych w obecności naładowanej kropki kwantowej (umieszczonej w centrum) oraz zewnętrznego pola magnetycznego. Z uwagi na pojawienie się drugiej cząstki (w kropce) [R3], uwzględniono wpływ oddziaływania Coulomba. Analiza prawdopodobieństw przejścia elektronu po różnych trajektoriach pokazała, że oscylacje Aharonova-Bohma są znacząco zaburzone wskutek obecności dodatkowego ładunku w kropce. Ponadto konsekwencją uwzględnienia korelacji elektronowych jest nieelastyczny charakter rozpraszania $e-e$ lub $e-h$, a w przypadku silnego rozpraszania może prowadzić do silnego tłumienia kwantowania strumienia pola magnetycznego. W przypadku kilku elektronów uwięzionych w pierścieniu otwartym, podobne obliczenia prawdopodobieństw przejścia pakietu falowego elektronów, w funkcji pola B, może prowadzić do ułamkowego kwantowania strumienia magnetycznego (tj. $\Phi_0/2$, $\Phi_0/3$, ...) w zależności od liczby elektronów w układzie (tj. 2, 3, ...). Wnioski płynące z tych prac można uznać za jedne z najważniejszych rezultatów rozprawy habilitacyjnej dr T. Chwieja.

Prace [R5-R6] są ukoronowaniem wcześniejszych badań i pokazują nie tylko umiejętności dr T. Chwieja modelowania realistycznych układów fizycznych, ale przede wszystkim Jego możliwości programistycznego rozwiązywania problemów kwantowych, od podstaw fizycznych aż do generowania map rozkładów gęstości ładunkowych dla bardzo szczególnych przypadków. Należy życzyć Habilitantowi, aby próba powiązania map tzw. konduktacji elektronowych stanów powierzchniowych uzyskiwana techniką mikroskopii bramki skanującej (SGM), z lokalnymi gęstościami stanów elektronowych w pobliżu energii Fermiego, przyniosła spodziewane sukcesy. Wówczas implementacja numeryczna problemu Poissona-Schrodingera, oryginalnie opracowana przez dr T. Chwieja w postaci pakietu obliczeniowego, mogłaby stać się efektywnym (oraz alternatywnym do metody funkcji Greena) narzędziem teoretycznym do interpretacji obrazów

uzyskiwanych techniką SGM, w oparciu o podstawową wielkość fizyczną dla elektronów, tj. gęstość stanów (DOS). Póki co, trudno jednoznacznie stwierdzić doniosłość wyników uzyskanych w pracach [R5-R6], niemniej zrobiły one na recenzencie duże wrażenie.

Ocena dorobku naukowego i dydaktycznego

Dr Tomasz Chwiej jest współautorem łącznie 20 artykułów (w tym 6 artykułów będących podstawą rozprawy habilitacyjnej) opublikowanych w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym (baza *Journal Citation Reports*). Z wyłączeniem 5 prac wydanych podczas realizacji pracy doktorskiej w grupie prof. S. Bednarka oraz 1 pracy związanej z pracą magisterską z innej dziedziny fizyki (badania radioizotopowe próbek wody), większość z nich powstała po doktoracie w okresie 9-10 lat, co wskazuje na niezłą efektywność publikacyjną Habilitanta. Należy dodać, że publikacje T. Chwieja (szczególnie te "habilitacyjne") są dwuautorskie i zwykle stanowią obszerne opracowanie zagadnienia (prace w *Physical Review B* liczące kilkanaście stron nie są częste!). Swoistym paradoksem, który znajduje jak sądzę uzasadnienie (patrz poniżej) jest to, że mimo ogólnie dobrej cytowalności prac (~240 cytowań, indeks $h=8$), niesatysfakcjonujący jest rezonans w środowisku międzynarodowym tych publikacji Habilitanta, w których jest pierwszym autorem (może poza publikacją [R2] cytowaną ponad 20 razy). Po części ma to związek z krótkim okresem od powstania prac, ale moim zdaniem spowodowane jest raczej brakiem ze strony autora należytego rozpowszechnienia swoich wyników. Dość zdumiewający jest dla mnie fakt, że dr T. Chwiej przez okres prawie 7 lat po doktoracie nie brał udziału w żadnej konferencji międzynarodowej, ani nawet krajowej. Uaktywnił się w ostatnich 3 latach, uczestnicząc w trzech konferencjach międzynarodowych, ale wszystkie one odbyły się w Polsce! Na podstawie przesłanej dokumentacji można wnosić, że również podczas studiów doktoranckich w takich konferencjach nie uczestniczył. Rezygnowanie z możliwości przekonywania potencjalnych oponentów, ale też z przyjemności uczestniczenia w merytorycznych dyskusjach, uważam za niewłaściwe. Nie sądzę, aby przyczyna leżała po stronie finansowej, gdyż Habilitant był wykonawcą dwóch projektów badawczych (1 KBN, 1 NCN). Dość krytycznie oceniam też brak naukowych wyjazdów zagranicznych i współpracy z zespołami badawczymi spoza macierzystej uczelni. Z wyłączeniem 6-miesięcznego stażu naukowego na Uniwersytecie w Antwerpii (w grupie prof. F. M. Peetersa) podczas studiów doktoranckich w 2004, który *nota bene* zaoowocował kilkoma świetnymi pracami (w tym najbardziej cytowanymi spośród publikacji ze współautorstwem Tomasza Chwieja), Habilitant nie odbył żadnego wyjazdu post-doktorskiego.

Nie jest moim zamiarem przesadne deprecjonowanie wystawionej powyżej wysokiej oceny rozprawy habilitacyjnej. Chciałbym jednak zaznaczyć, że Habilitant powinien bardziej zadbać o

aktywną wymianę naukową (np. z grupą doświadczalną) oraz poświęcić więcej czasu na prezentacje swoich wyników na znanych forach naukowych. Jaśniejszym fragmentem tej części mojej recenzji niech będzie fakt, że T. Chwiej był recenzentem prawie 40 artykułów do takich czasopism jak *Phys. Rev Lett.*, *Phys. Rev. B i E*, *Journal of Physics: C i D*, co jednak świadczy o uznaniu w środowisku międzynarodowym.

Jak sądzę źródłem ograniczonej aktywności konferencyjnej i wyjazdowej Habilitanta jest duża aktywność dydaktyczno-naukowa, widziana z perspektywy WFIS AGH. Potwierdzeniem może być otrzymanie aż 8 Nagród Rektora AGH za działalność naukową oraz zespołowej Nagrody Ministra Edukacji w 2005. Ponadto, Tomasz Chwiej w okresie kiedy był asystentem (2005-2007), a następnie adiunktem (2008-2014), pełnił rolę opiekuna ponad 20 prac inżynierskich oraz 8 prac magisterskich, co jest dowodem nieprzeciętnej wprost kreatywności i pracowitości młodszego Kolegi. Przywilejem recenzenta pracującego na uniwersytecie jest zwrócenie uwagi na ważne formy działalności dydaktycznej Habilitanta (co nie zawsze jest dostrzegane w przewodach habilitacyjnych), do jakich należy uczenie studentów. T. Chwiej od 2005 prowadzi regularnie zajęcia dydaktyczne (wykłady, ćwiczenia, laboratoria) na studiach inżynierskich i magisterskich WFIS (kierunki: Fizyka Techniczna, Informatyka Stosowana) z fizyki ogólnej, fizyki teoretycznej, mechaniki kwantowej oraz metod obliczeniowych w fizyce. Od kilku lat prowadzi też autorski wykład "Metody Numeryczne". Miałem okazję hospitować zajęcia Habilitanta, które oceniłem bardzo wysoko nie tylko z uwagi na kompetencje i umiejętności dydaktyczne Prowadzącego, ale też ze względu na dobry kontakt ze studentami i atmosferę na zajęciach.

W podsumowaniu stwierdzam na podstawie przedstawionego cyklu sześciu publikacji, jak też po przegłównięciu dorobku naukowo-dydaktycznego uzyskanego po otrzymaniu stopnia doktora, że dr Tomasz Chwiej całkowicie spełnia wymagania *Ustawy z dnia 14 marca 2003 o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. nr 65, poz. 595, z późniejszymi zmianami)*.

Wysoki poziom uzyskanych wyników oraz oryginalność tematyki podjętych badań teoretycznych, w wielu aspektach dotyczących kanonicznych problemów mechaniki kwantowej (m.in. badanie specyfiki i uwarunkowań oscylacji Aharonova-Bohma) powodują, że pomimo słabego rozpowszechnienia w środowisku międzynarodowym rezultatów uzyskanych przez dr T. Chwieja, mogą one zaowocować dużym uznaniem w przyszłości. Pewien brak aktywności konferencyjnej i współpracy naukowej, Habilitant zrównoważył nieprzeciętną wprost aktywnością dydaktyczną.

Wnoszę o dopuszczenie dr T. Chwieja do dalszych etapów postępowania kwalifikacyjnego.

