



Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. inż. Wojciecha Paska "Własności układów dziurowych w kropkach kwantowych: mieszanie pasm walencyjnych, własności optyczne oraz spinowe"

Praca doktorska mgr. inż. Wojciecha Paska ma formę monotematycznego zbioru czterech artykułów naukowych, z których dwa pierwsze zostały opublikowane w czasopiśmie *Physical Review B* (w 2012 i 2014 roku), zaś dwa pozostałe w *Semiconductor Science and Technology* (w 2014 i 2015 roku). Pan Wojciech Pasek jest pierwszym autorem wszystkich czterech artykułów, a Jego wkład pracy był - według oświadczeń współautorów - wiodący. Pozostałymi autorami publikacji wchodzących w skład Rozprawy są: Prof. Bartłomiej Szafran, promotor (wszystkie cztery pozycje), oraz dr inż. Maciej Nowak, promotor pomocniczy (trzy artykuły opublikowane w latach 2014 i 2015). Wszystkie wymienione publikacje mają charakter oryginalnych artykułów badawczych, a ich objętość wynosi od 9 do 13 stron (w formacie dwukolumnowym). Rozprawę uzupełniają krótkie i zwarte materiały dodatkowe (łącznie niespełna 40 stron), w których Autor omawia tematykę rozprawy i prezentuje systematyczny zbiór informacji wprowadzających do poszczególnych zagadnień badawczych, a także przedstawia streszczenia otrzymanych wyników.

Zasadniczym celem recenzowanej rozprawy było zrozumienie wpływu sprzężenia pomiędzy pasmami dziurowymi o istotnie różnych masach efektywnych (tzw. *lekkie* i *ciężkie dziury*), którego przyczyną może być np. oddziaływanie spin-orbita, na wybrane zjawiska zachodzące w układach nanoelektronicznych (kropkach i drutach kwantowych). W szczególności, rozważane były trzy charakterystyki wspomnianych układów:

- A. Widma fotonów emitowanych przez układ dwóch samozorganizowanych kropek kwantowych w wyniku rekombinacji ekscytonów.
- B. Oddziaływanie wymiany w układzie dwóch kropek kwantowych.
- C. Dynamika przejść spinowych w cylindrycznej kropce (tj. fragmencie drutu kwantowego) umieszczonej w stałym polu magnetycznym i poddanej działaniu zmiennych pól elektrycznych.

Prezentowane badania wydają się być motywowane, w równym stopniu, dwiema przesłankami istotnymi dla fizyki półprzewodnikowych kropek kwantowych i układów pokrewnych. Po pierwsze, kropki kwantowe są mezoskopowymi analogami atomów (a ich układy - analogami molekuł), których własności mogą być w znacznym stopniu sterowane za pośrednictwem przyłożonych pól elektrycznych. Taka sytuacja stwarza unikalne możliwości testowania przewidywań mechaniki kwantowej, jak również otwiera pole działań nazywanych inżynierią stanów kwantowych, w ramach których możliwe jest tworzenie stanów niewystępujących w standardowej fizyce atomowej i molekularnej (przykładem rozważanym w recenzowanej rozprawie jest tzw. *niewiążący stan podstawowy sztucznej molekuly dwuatomowej*). Po drugie, szereg potencjalnych zastosowań praktycznych kropek kwantowych inspirowane badania teoretyczne i doświadczalne nad emisją i absorpcją promieniowania elektromagnetycznego przez te układy (szczególnie w zakresie energii odpowiadających światłu widzialnemu), jak również nad fizycznymi podstawami przetwarzania informacji kwantowej (ze szczególnym uwzględnieniem kontroli stanów tzw. kubitów spinowych).

Omówię teraz pokrótce zasadnicze wyniki przedstawione w publikacjach stanowiących recenzowaną rozprawę doktorską.

W pierwszej pracy [W.J. Pasek and B. Szafran, *Negative trion emission spectrum in stacked quantum dots: External electric field and valence band mixing*, Phys. Rev. B **85**, 085301 (2012) pp. 1-9] Autorzy opisali badania teoretyczne stanów kwantowych ekscytonów w samozorganizowanej podwójnej kropce kwantowej. Poszczególne parametry mikroskopowe dyskutowanej *molekuly kwantowej* dobrano tak, aby jej fizyczną realizacją mógł być układ dwóch płaskich dysków InGaAs/GaAs, o promieniu 10 nm i wysokościach (odpowiednio) 2 nm oraz 2.1 nm. Założona asymetria miała na celu odtworzenie parametrów typowego układu, jaki powstaje w wyniku realnych (z natury niedoskonałych) procesów technologicznych, a otrzymane wyniki dotyczące wybranych wielkości mierzalnych były następnie porównywane z wyidealizowanym przypadkiem symetrycznej kropki. W szczególności, dyskutowany był charakter stanu podstawowego pojedynczej dziury, który to stan - przy odpowiednim doborze parametrów - może być typu niewiążącego (ang. *antibonding*), co nie jest spotykane w analogicznych układach molekularnych (tj. jednokrotnie zjonizowanych ujemnie cząsteczkach dwuatomowych). Praca zawiera także szczegółową analizę numeryczną widm fotoluminescencyjnych rozważanego układu, która może być podstawą weryfikacji doświadczalnej opisanego wyżej efektu.

Zastosowana metodologia obliczeniowa wyrasta z czteropasmowego modelu Kohna-Luttingera, który został rozszerzony o dwucząstkowe wyrazy opisujące oddziaływanie kulombowskie. Następnie, wielocząstkowe funkcje wariacyjne dziur i ekscytonów konstruowane były metodą konfiguracji oddziaływania, w ramach schematu samouzgodnionego przy upraszczającym założeniu symetrii osiowej

układu. Takie podejście jest przykładem adaptacji metod znanych z chemii kwantowej do opisu sztucznych atomów i molekuł. Otrzymane w ten sposób wyniki wskazują na istotną rolę separacji przestrzennej dysków, która - jeśli jest odpowiednio duża - powoduje, iż cechy charakterystyczne dla stanu niewiążącego przestają być widoczne w widmie fotoluminescencyjnym układu. Pokazano ponadto, że odpowiednio dobrane pole elektryczne może osłabić, a nawet całkowicie zneutralizować, wpływ asymetrii na widmo fotoluminescencyjne.

Druga praca [W.J. Pasek, M.P. Nowak, and B. Szafran, *Optical signatures of valence-band mixing in positive trion recombination spectra of double quantum dots*, Phys. Rev. B **89**, 245303 (2014) pp. 1-13] stanowi naturalną kontynuację poprzedniej; podobnie jak ona dotyczy zatem zagadnienia A z listy przedstawionej na początku tej recenzji. Dyskusja stanów kwantowych podwójnej kropki została tutaj rozszerzona poprzez uwzględnienie dodatkowych kompleksów ekscytonowych, tzw. trionów dodatnich, zaś Autorzy skoncentrowali się na poszukiwaniu efektów mieszania pasm walencyjnych w widmach rekombinacyjnych układu. Obliczenia oparte o rozszerzony model Kohna-Luttingera (zob. powyżej) porównano z wynikami otrzymanymi w ramach modelu izotropowych mas efektywnych, w obu przypadkach dyskutując zarówno układ o niewielkiej asymetrii jak i układ idealnie symetryczny. Jakościowe różnice w przebiegu procesu dysocjacji ekscytonu, w zależności od przyjętego modelu (jak również separacji przestrzennej kropek) zilustrowano za pomocą diagramów ukazujących lokalizację przestrzenną nośników ładunku, których względne położenie przyjęto za podstawę klasyfikacji szczegółowej możliwych do zaobserwowania stanów trionu.

W trzeciej pracy [W.J. Pasek, B. Szafran, and M.P. Nowak, *Spin exchange energy for a pair of valence band holes in artificial molecules*, Semicond. Sci. Technol. **29**, 115022 (2014) pp. 1-10] analizowano wpływ mieszania pasm walencyjnych (czyli tzw. lekkiej i ciężkiej dziury) na całość wymiany opisującą oddziaływanie spinów dwóch dziur uwięzionych w molekułe kwantowej, której fizyczną realizacją może być układ podobny do rozważanego w dwóch pierwszych pracach; artykuł dotyczy zatem zagadnienia B. Opisane badania zostały zainspirowane pracą teoretyczną Yakimova *i in.* [Phys. Rev. B **81**, 115434 (2010)], która dotyczyła układu dwóch piramid germanowych w otoczeniu krzemu. Yakimov *i in.* pokazali w szczególności, że dla odpowiednio dobranych parametrów układu cała wymiany może całkowicie zniknąć (co objawia się równoważnością energetyczną stanów singletowego i trypletowego pary dziur), a przyczyny tego zjawiska upatrywano w mieszanii pasm walencyjnych i nierównoważności kropek wynikającej z obecności naprężeń mechanicznych na granicy germanu i krzemu. Pasek i współautorzy pokazali jednak, że wspomniana degeneracja singlet-tryplet może wystąpić także w układzie identycznych kropek kwantowych, a zatem wyjaśnienie zaproponowane przez Yakimova *i in.* nie może być trafne. Co więcej, nierównoważność kropek kwantowych wydaje się raczej przeciwdziałać

rozważanemu efektowi. Dokładna analiza szeregu modeli efektywnych pokazała, że zasadniczą przyczyną występowania degeneracji singlet-tryplet jest oddziaływanie elektrostatyczne dziur, nie zaś asymetria układu. Autorzy omawiają także szczegółowo ewolucję widma układu o ustalonych parametrach wewnętrznych przy zmianie przyłożonego pola elektrostatycznego, co pozwala lepiej zrozumieć naturę zjawisk towarzyszących znikaniu całki wymiany. Warto nadmienić, że problem elektrostatycznej kontroli oddziaływania spinów cząstek uwięzionych w kropkach kwantowych jest jednym z najistotniejszych, które muszą zostać rozwiązane aby możliwa była realizacja obliczeń kwantowych z wykorzystaniem układów tej klasy.

Czwarta praca [W.J. Pasek, M.P. Nowak, and B. Szafran, *Valence band mixing versus higher harmonic generation in electric-dipole spin resonance*, *Semicond. Sci. Technol.* **30**, 055017 (2015) pp. 1-10] dotyczy przejść rezonansowych, wywołanych oscylującym polem elektrycznym, a zachodzących w kropce kwantowej wydzielonej z drutu InAs (por. zagadnienie C). Układ umieszczony jest w stałym polu magnetycznym skierowanym równoległe do osi symetrii drutu. W stanie podstawowym, w kropce znajduje się pojedyncza dziura. Autorzy pokazują, że chociaż główne przejścia rezonansowe spełniają reguły wyboru wynikające z parzystości spinorów Luttingera (które obowiązują w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń) wkład dodatkowych przejść (dozwolonych w wyższych rzędach) staje się istotny w przypadku, gdy stan początkowy lub końcowy jest bliski innemu stanowi energetycznemu układu. Szczegółowe warunki, w których uaktywniają się takie przejścia wzbronione, zostały przestudiowane w systematyczny sposób poprzez porównanie widm układów o różnych geometriach (dyskutowano w szczególności własności kropek w kształcie wydłużonego cylindra i płaskiego dysku) dla różnych wartości indukcji przyłożonego pola magnetycznego. Analizowany był także wpływ geometrii układu i indukcji pola magnetycznego na zjawisko mieszania pasm walencyjnych tzw. lekkiej i ciężkiej dziury.

Wspomniany nieco wyżej równy nacisk położony na zagadnienia fundamentalne fizyki układów nanoskopowych, oraz na powiązane z nimi aspekty aplikacyjne, stanowi sprawdzony przepis na otrzymanie wartościowych wyników w dziedzinie teorii materii skondensowanej. Recenzowana rozprawa potwierdza tę regułę. Autor bez wątpienia wykazał się znaczną biegłością w posługiwaniu się zaawansowanymi modelami i technikami obliczeniowymi odpowiednimi dla badań teoretycznych układów półprzewodnikowych kropek kwantowych, a rzetelnie przygotowane materiały dodatkowe dowodzą głębokiego rozumienia dyskutowanych problemów badawczych. Warto zwrócić uwagę również na dociekliwość i determinację w dążeniu do prawdy naukowej, która ujawnia się

najpełniej w przypadku trzeciego spośród artykułów wchodzących w skład rozprawy [Pasek *i in.*, *Semicond. Sci. Technol.* **29**, 115022 (2014)], w którym w istocie obalono jedną z głównych tez dobrze przyjętej w środowisku pracy Jakimowa *i in.* z 2010 roku.

Jestem w pełni przekonany, że przedstawiona rozprawa spełnia wszystkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane pracom doktorskim i ***wnioskuje o dopuszczenie Doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.*** Biorąc pod uwagę potencjalne znaczenie otrzymanych wyników dla zrozumienia fizyki układów, które w niedalekiej przyszłości mogą stać się częściami składowymi komputerów kwantowych, znaczną rangę czasopism naukowych, w których zostały opublikowane artykuły stanowiące recenzowaną rozprawę doktorską, jak również wiodący wkład mgr. inż. Wojciecha Paska w każdą z publikacji (warto zauważyć, że każdy z czterech artykułów ma co najwyżej trzech autorów) uważam, że osiągnięcia Doktoranta są ponadprzeciętne, i ***wnioskuje także o wyróżnienie rozprawy.***



Adam Rycerz

Kraków, 4 sierpnia 2015