

dr hab. Mariusz Krawiec, prof. UMCS  
Katedra Fizyki Powierzchni i Nanostruktur  
Instytut Fizyki  
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej  
pl. M. Curie-Skłodowskiej 1  
20-031 Lublin

Lublin, 15 lutego 2021

**Recenzja rozprawy doktorskiej pana mgr. inż. Michała Górskiego  
pt. „Szybka inicjalizacja spinu elektronów uwięzionych w elektrostatycznych  
kropkach kwantowych zbudowanych na bazie katalitycznie hodowanych  
półprzewodnikowych drutów kwantowych”**

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska pana mgr. inż. Michała Górskiego została wykonana na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie pod kierunkiem prof. dr. hab. Stanisława Bednarka. Promotorem pomocniczym był dr inż. Jarosław Pawłowski zatrudniony na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej.

Rozprawa liczy 103 strony i ma strukturę klasyczną. Została podzielona na trzy ponumerowane rozdziały, wprowadzenie oraz podsumowanie, a także opatrzona streszczeniem w języku polskim i angielskim oraz bibliografią zawierającą 70 pozycji, w tym trzy prace, których współautorem jest p. Górski. Sposób doboru źródeł dowodzi należytej staranności właściwej dla prowadzenia badań naukowych. Wyniki badań zaprezentowane zostały na 47 rysunkach oraz w 4 tabelach. Struktura pracy jest przejrzysta, sama praca została napisana w sposób przemyślany i z dbałością o szczegóły, co sprawia, że czyta się ją z przyjemnością. W zasadzie strona redakcyjna nie budzi zastrzeżeń.

Problematyka pracy dotyczy obliczeń kwantowych, fascynującej dziedziny badań naukowych, w której fizyka kwantowa spotyka się z informatyką, a informacja przetwarzana jest zgodnie z zasadami mechaniki kwantowej. Idea obliczeń kwantowych nie jest nowa, bo pojawiła się ok. 40 lat temu, ale praktyczna realizacja obliczeń z wykorzystaniem komputera kwantowego nadal jest ogromnym wyzwaniem współczesnej nauki. Podstawową jednostką informacji jest kubit, który może być realizowany na różne sposoby w układach posiadających dwa stany. Najbardziej znane przykłady realizacji kubitów wykorzystują fotony, elektrony, jądra atomowe, sieci optyczne, kropki kwantowe, złącza Josephsona, struktury van der Waalsa, czy układy topologiczne. Jednym z obiecujących kierunków badań wydaje się być wykorzystanie spinu elektronu umieszczonego w nanoskopowym urządzeniu półprzewodnikowym. Pod tym względem problematyka rozprawy jest bardzo aktualna i ważna.

Praca poświęcona jest badaniom teoretycznym wstępnego etapu procesu obliczeń kwantowych z wykorzystaniem spinów elektronów. Aby można było przeprowadzić takie obliczenia w praktyce,

musi zostać przygotowany odpowiedni stan początkowy, w którym spiny elektronów będą ustawione w określonym kierunku. Na przykład w elektrostatycznie zdefiniowanych kropkach kwantowych taki stan generuje się dzięki relaksacji spinów w silnym polu magnetycznym. Niestety operacja ta jest raczej czasochłonna i niezbyt dokładna. W niniejszej rozprawie zaproponowana została metoda inicjalizacji spinu elektronu w elektrostatycznych kropkach kwantowych wytworzonych na bazie jednowymiarowej nanostruktury półprzewodnikowej z wykorzystaniem jedynie pola elektrycznego. Jest ona dość szybka i dokładna.

Rozprawa skupia się na opisie teoretycznym dynamiki spinu elektronu w nanourządzeniu półprzewodnikowym opartym na drucie kwantowym antymonku indu (InSb) otoczonym warstwą dielektryka i poddanym działaniu pól elektrycznych. Zasada działania urządzenia wykorzystuje oddziaływanie spin-orbita typu Rashby do sterowania ruchem i kierunkiem spinu elektronu. Cały proces przygotowania stanu wejściowego można podzielić na dwie fazy: (i) przestrzenną separację spinów w dwóch elektrostatycznych kropkach kwantowych oraz (ii) jednoczesne obroty spinów w przeciwnych kierunkach w tych kropkach. Działanie zaproponowanego nanourządzenia zostało prześledzone przy pomocy symulacji komputerowych, rozwiązując numerycznie w sposób samogodny zależne od czasu równanie Schrödingera oraz równanie Poissona.

We wprowadzeniu zwięźle nakreślono tematykę pracy oraz umiejscowiono ją na płaszczyźnie zagadnień związanych z koncepcją komputera kwantowego. Można w nim znaleźć krótki rys historyczny, pojęcie podstawowej jednostki informacji – kubitów oraz przykłady najbardziej popularnych sposobów jego realizacji wraz z kryteriami, które musi spełniać układ realizujący. W dalszej części wprowadzenia jasno i precyzyjnie zdefiniowano przedmiot i cel badań, którym jest projekt nanourządzenia zdolnego do szybkiej i dokładnej inicjalizacji spinu pojedynczego elektronu bez wykorzystania pola magnetycznego lub fotonów. Następnie krótko omówiono budowę i zasadę działania proponowanego urządzenia oraz strukturę samej pracy.

W rozdziale pierwszym przedstawiono podstawowe założenia wykorzystanych w pracy symulacji komputerowych. Omówiono podstawy teoretyczne badanych zagadnień, stosowane metody obliczeniowe oraz ich numeryczną implementację wraz z testami dokładności symulacji. Jako że przedmiotem badań jest urządzenie oparte na drucie kwantowym, naturalnym wyborem było przyjęcie geometrii cylindrycznej układu. Ponieważ widmo elektronów w kierunkach poprzecznych jest dyskretne z powodu kwantowego efektu rozmiarowego, zastosowano przybliżenie jednowymiarowe, w którym elektron może poruszać się jedynie wzdłuż drutu, zakładając przy tym, że cały czas będzie znajdował się w najniższym stanie energetycznym dla kwantowania poprzecznego. Ostatnie założenie nakłada ograniczenie na energie kinetyczne elektronu. Rozpatrywane w pracy wartości energii wydają się spełniać powyższe założenie, ale być może warto byłoby to sprawdzić w odpowiednich testowych obliczeniach w trzech wymiarach.

Zagadnienie ruchu elektronu w jednowymiarowym układzie rozpatrywano w przybliżeniu masy efektywnej, uwzględniając także oddziaływanie spin-orbita typu Rashby. Ewolucję czasową funkcji falowej cząstki analizowano rozwiązując iteracyjnie zależne od czasu równanie Schrödingera, a do wyliczenia postaci funkcji falowej stanu podstawowego wykorzystano metodę ewolucji w czasie urojonym. Potencjał, którego doświadcza elektron w badanym układzie, był liczony z równania Poissona w sposób iteracyjny dla każdego kroku czasowego. Otrzymany w ten sposób rozkład potencjału elektrostatycznego uwzględnia geometrię układu wraz z dodatkowymi elektrodami, jak i potencjał pochodzący od ładunku indukowanego.

---

Dużo uwagi poświęcono numerycznej implementacji badanego zagadnienia. Opisano metodę

obliczania drugiej pochodnej przestrzennej z wykorzystaniem dyskretyzacji zmiennej oraz przeprowadzono jej testy. Okazało się, że najprostsza, 3-punktowa wersja metody jest niewystarczająca w obecnym przypadku, a najbardziej ekonomiczną metodą jest metoda 11-punktowa. Pozwala ona na przyjęcie dość dużego kroku siatki przy jednoczesnym zachowaniu akceptowalnej dokładności obliczeń. Na tej podstawie wybrano metodę obliczania pierwszej pochodnej przestrzennej, która także jest 11-punktowa. Przetestowano również spełnienie warunku brzegowego dla równania Poissona w postaci znikania pochodnej normalnej potencjału na ścianach obszaru przestrzennego wziętego do obliczeń, tzw. pudła obliczeniowego.

Dość jasny i klarowny sposób prezentacji powyższych zagadnień bez wątplenia świadczy o doskonałym opanowaniu warsztatu teoretycznego przez doktoranta. Warto także podkreślić, że w pracy testowano spełnienie odpowiednich warunków brzegowych, czy optymalizowano metody numeryczne, co wskazuje na dużą świadomość i dojrzałość naukową doktoranta.

Rozdział drugi prezentuje wyniki obliczeń wpływu sterowanego polem elektrycznym oddziaływania spin-orbita typu Rashby na dynamikę elektronu w modelowym drucie kwantowym. Przyłożone poprzeczne pole elektryczne generowało oddziaływanie Rashby, które wpływało na ruch elektronu wzdłuż drutu kwantowego, o ile elektron ten miał odpowiednio skierowany spin. W konsekwencji możliwe było wprawianie w ruch bądź zatrzymywanie elektronu stosując odpowiednie skokowe lub ciągłe zmiany pola elektrycznego. Warto zauważyć, że za zmianę kierunku ruchu cząstki odpowiedzialna była jedynie wartość pola elektrycznego w stosunku do jej wartości początkowej. Wykorzystując dodatkowo odbicie pakietu falowego od bariery potencjału na końcu drutu możliwe było przyspieszanie elektronu. Pokazano to dla skokowych zmian pola elektrycznego jak i dla pojedynczych impulsów. Taki sposób przyspieszania elektronu, w którym pole elektryczne jest przełączane pomiędzy poszczególnymi odbiciami cząstki od barier potencjału, pozwala na uzyskanie relatywnie dużych prędkości przy zastosowanych niewielkich polach. Jest to bardzo ważne w przypadku realistycznych układów, w których przyłożenie zbyt silnego pola elektrycznego może przenieść elektron poza drut kwantowy. Pewną wadą metody jest długi czas całego procesu przyspieszania, który można zmniejszyć stosując zmiany zwrotu pola elektrycznego. Inną słabą stroną metody, szczególnie w kontekście realizacji eksperymentalnej, są coraz krótsze odstępy czasu, w których powinny następować zmiany pola elektrycznego. Aby uprościć sposób zmian pola elektrycznego, zamiast prostokątnej studni potencjału, zaproponowano zastosowanie potencjału uwięzienia w formie parabolicznej. W takim potencjale pakiet falowy będzie oscylował wokół położenia równowagi ze stałą częstotliwością, co w konsekwencji pozwoli na wykorzystanie zmiennego pola elektrycznego o stałej częstotliwości do przyspieszania elektronu.

Zmienne sprzężenie spin-orbita powoduje przyspieszanie elektronu w kierunku zależnym od orientacji jego spinu, więc możliwe było poruszanie się elektronu ze spinem do góry w przeciwną stronę niż elektron ze spinem do dołu. Podobnie działo się w przypadku kombinacji liniowej obydwu stanów spinowych. Jednak, aby rozdzielić przestrzennie składowe pakietu falowego o przeciwnych spinach stosując niewielkie wartości pola elektrycznego, wymagana jest kompensacja potencjału indukowanego odpowiedzialnego za samoogniskowanie elektronowej funkcji falowej. Nie ma tego problemu w przypadku silnych pól, ale wtedy można usunąć elektron z drutu kwantowego. Aby temu zapobiec zaproponowano zastosowanie izolatora okalającego drut kwantowy. Metoda silnych pól pozwala na uzyskanie szybszej separacji spinów.

Rozdział trzeci to zasadnicza część rozprawy. Zawiera on opis proponowanego nanourządzenia opartego na półprzewodnikowym drucie kwantowym InSb oraz zasady jego działania. Urządzenie jest poniekąd modyfikacją zaproponowanego kilka lat wcześniej układu bazującego na planarnej



heterostrukturze półprzewodnikowej. Proces inicjalizacji spinu w urządzeniu planarnym był podzielony na dwa etapy: separację spinu oraz jego obrót. Stosowano sinusoidalne zmiany pola elektrycznego o niewielkim natężeniu, a wszystko to trwało około 400 ps. Ogólna zasada działania obecnie proponowanego urządzenia jest identyczna jak urządzenia planarnego, z tym że zamiast wielookresowych periodycznych zmian pola elektrycznego używano silnych pojedynczych impulsów. Było to możliwe dzięki zastosowaniu warstwy dielektrycznej wokół drutu półprzewodnikowego. Przyłożone impulsy generujące silne oddziaływanie Rashby separowały przestrzenie spinu, które były pułapkowane w dwóch elektrostatycznych kropkach kwantowych, a następnie obracały je w obydwu kropkach w taki sposób, aby cały spin elektronu skierowany był wzdłuż drutu półprzewodnikowego. Cały proces trwał zaledwie 60 ps, czyli prawie o rząd wielkości krócej niż w przypadku urządzenia planarnego. Nie wpłynęło to jednak na dokładność inicjalizacji, która przekraczała 99,5% dla dowolnej konfiguracji spinów początkowych.

Projekt urządzenia przewiduje wytworzenie go na silnie domieszkowanym podłożu krzemowym, jednocześnie pełniącym rolę elektrody dolnej, pokrytym warstwą  $\text{SiO}_2$ , na którym przewidziano umieszczenie siedmiu elektrod metalowych. Zadaniem tych elektrod ma być formowanie odpowiedniego potencjału służącego do uwięzienia elektronów w kierunku równoległym do osi drutu, w szczególności wytworzenie dwóch elektrostatycznych kropek kwantowych. Dalej powinien być osadzony nanodrut InSb otoczony warstwą dielektryka  $\text{Si}_3\text{N}_4$  z zanurzonymi dodatkowymi elektrodami, służącymi do generowania poprzecznego pola elektrycznego, które zostanie użyte do przestrzennego rozdzielania spinów. Całość ma być przykryta warstwą metaliczną – elektrodą górną, która wraz z elektrodą dolną posłuży do wytworzenia pola elektrycznego sterującego obracaniem spinu.

Sercem urządzenia jest nanodrut półprzewodnikowy służący do inicjalizacji spinu elektronu. Aby operacja rozdzielania i odwrócenia spinu była szybka, należy użyć materiału charakteryzującego się silnym sprzężeniem spin-orbita. Z tego też powodu wybór padł na InSb.

Działanie układu zostało dokładnie przebadane w serii symulacji numerycznych polegających na samozgodnym rozwiązywaniu zaleźnego od czasu równania Schrödingera wraz z uogólnionym równaniem Poissona. W tym miejscu warto podkreślić, że przeprowadzone obliczenia uwzględniały geometrię urządzenia wraz ze szczegółami jego budowy. Dotyczy to także przyłożonych do elektrod napięć, jak i oddziaływania elektronu z ładunkiem indukowanym na elektrodach oraz w warstwie izolacyjnej. Co jest również bardzo ważne, parametry przyjęte do obliczeń były charakterystyczne dla konkretnych materiałów przewidzianych do skonstruowania urządzenia.

Czytając pracę można odnieść wrażenie, że urządzenie zostało starannie zaprojektowane, a zastosowanie każdego jego elementu dobrze przemyślane. Przeprowadzone symulacje dążyły do wiernego odwzorowania rzeczywistości w postaci doboru odpowiednich parametrów obliczeń jak i dbałości o szczegóły geometrii układu. Podczas lektury rozprawy nasunęły mi się jednak dwie uwagi. Pierwsza, o której już wspominałem wcześniej, dotyczy użytego przybliżenia jednowymiarowego. Druga, poniekąd związana z pierwszą, odnosi się do problemu optymalizacji i stabilności pracy urządzenia. Co prawda, zagadnienie stabilności, czy może dokładności pracy układu, w kontekście ustawienia docelowego kierunku spinu zostało bardzo dokładnie przedyskutowane, ale chodzi tutaj raczej o określenie lub przynajmniej oszacowanie zakresu zmian wartości wybranych parametrów pracy układu, takich jak częstotści i amplitudy napięć, czy rozmiarów poszczególnych elementów urządzenia.

W podsumowaniu należy stwierdzić, że tematyka podjęta w rozprawie pana magistra inżyniera Michała Górskiego jest ciekawa i aktualna. Za osiągnięcie doktoranta należy uznać zaprojektowanie

urządzenia do inicjalizacji spinu elektronu oraz przeprowadzenie szczegółowej i profesjonalnej analizy jego działania. Raz jeszcze podkreślę staranność i dbałość o szczegóły projektu oraz dążenie doktoranta do jak najwierniejszego odwzorowania urządzenia w symulacjach komputerowych. Możliwe to było dzięki dobrej znajomości mechaniki kwantowej, opanowaniu stosownych metod obliczeniowych oraz nabyciu sporego doświadczenia w prowadzeniu obliczeń tego typu. Pod względem edytorskim praca jest praktycznie bez zarzutu i czyta się ją z przyjemnością.

Konkludując stwierdzam, że recenzowana rozprawa spełnia wszystkie zwyczajowe i ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie pana magistra inżyniera Michała Górskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Mariusz Krawiec

