



Prof. dr hab. Michał Zieliński
Instytut Fizyki
Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
ul. Grudziądzka 5/7
87-100 Toruń

Toruń, 9 czerwca 2025 r.

Recenzja pracy doktorskiej mgr. Tanmaya Thakura
pt. Electron States Confined in Electrostatic Quantum Dots Defined within Phosphorene

Pan mgr Tanmay Thakur przygotował rozprawę doktorską pod opieką promotora, prof. dr. hab. inż. Bartłomieja Szafrana. Praca dotyczy teoretycznych badań własności widmowych kropek kwantowych definiowanych bramkami (wytworzonych poprzez zewnętrzny potencjał elektrycznych) w fosforenie, tj. jednoatomowej grubości warstwie (kwazi-jednowymiarowej) fosforu (analog grafenu bądź silicenu).

Praca koncentruje się na badaniach wspomnianych układów z wykorzystaniem metody masy efektywnej połączonej w metodą oddziaływania diagonalizacji (zwanej też w tym kontekście dokładną diagonalizacją) oraz (w jednych z artykułów) rachunkami zależnymi od czasu. Część obliczeń metodą masy efektywnej porównywana jest z obliczeniami uzyskanymi metodą ciasnego wiązania.

W skład pracy wchodzi pięć publikacji naukowych w recenzowanych czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym, w tym dwie prace w *Physical Review B* oraz trzy prace w *Scientific Reports*. Całość została opatrzona wstępem (w tym wstępem metodologicznym) oraz krótkim podsumowaniem. Ta część rozprawy została napisana czytelnym i poprawnym językiem o dużych walorach dydaktycznych. Spis literatury jest bardzo bogaty i zawiera 239 pozycji, w tym liczne odnośniki do najnowszych prac z dziedziny. Rozprawę uzupełnia spis rysunków.

Pierwszy artykuł wchodzący w skład rozprawy (Thakur, T., & Szafran, B., Phys. Rev. B 105, 165309 (2022)) analizuje wpływ anizotropii masy efektywnej w monowarstwie fosforenu na oscylacje Bohma-Aharonova w pierścieniach kwantowych. Autorzy pokazują, że eliptyczna deformacja potencjału ograniczającego pozwala, dla określonego współczynnika deformacji kształtu, na kompensację anizotropii pochodzącą od masy efektywnej, prowadząc do odtworzenia oscylacji Bohma-Aharonova i uzyskania widma typowego dla pierścienia o idealnej symetrii cylindrycznej. Autorzy przedstawiają analizę zarówno w modelu ciasnego wiązania, jak i w modelu masy efektywnej, a także wprowadzają uogólniony moment pędu komutujący z Hamiltonianem układu dla zdeformowanego przypadku. W pracy poruszono także przypadek

dwuelektronowy, wskazując na obecność zanikających, lecz wciąż widocznych oscylacji przy odpowiednio dobranym potencjale.

W drugim artykule wchodzącym w skład rozprawy (Thakur, T., & Szafran, B., Phys. Rev. B 106, 205304 (2022)) autorzy badają formowanie się molekuł Wignera w kropkach kwantowych z fosforenu wiążących do pięciu elektronów. Ze względu na duże wartości efektywnych mas, przestrzenna separacja ładunku elektronowego zachodzi już w relatywnie małych strukturach, sprzyjając krystalizacji Wignera. Wykazano przy tym, że anizotropia masy prowadzi do konfiguracji ładunkowych niezachowujących symetrii potencjału ograniczającego. Molekuły Wignera powstają dla układów zawierających parzystą liczbę elektronów (2 i 4), a ich obecność objawia się m.in. niemal zdegenerowanymi stanami podstawowymi, polaryzacją spinową oraz charakterystycznymi przerwami energetycznymi. Obliczenia przeprowadzono metodą masy efektywnej, a następnie metodą oddziaływania konfiguracji z optymalizowaną (w celu lepszej zbieżności) bazą jednoelektronową.

W trzecim z artykułów wchodzących w skład rozprawy (Thakur, T., & Szafran, B., Sci. Rep. 13, 9707 (2023)) autorzy analizują powstawanie i ewolucję wirów (ang. *vortex*) w molekułach Wignera w obecności silnych pól magnetycznych. Autorzy wykazują, że anizotropia – zarówno w masie efektywnej, jak i potencjale ograniczającym – wpływa istotnie na lokalizację wirów. W przypadku układu izotropowego, wiry „przemieszczają się” gwałtownie przy zmianach momentu pędu, natomiast w układach anizotropowych „ewoluują” płynnie z polem. Szczególnie interesujące są różnice między orientacjami molekuł Wignera w fosforenie: dla osi „*armchair*” wiry pozostają poza osią układu, natomiast dla kierunku „*zigzag*” przemieszczają się na oś molekuły. Zjawiskom tym towarzyszy tworzenie i anihilacja antywirów.

W czwartym z artykułów wchodzących w skład rozprawy (Thakur, T., & Szafran, B., Sci. Rep. 13, 18796 (2023)) przedstawione są teoretyczne badania występowania ferromagnetyzmu Nagaoki w kwadratowej sieci czterech kropek kwantowych z fosforenu zawierającej trzy elektrony przy czym, taka konfiguracja sprzyja ukształtowaniu się stanu całkowicie spolaryzowanego spinowo. Autorzy pokazują, że odpowiednia geometria układu – w szczególności dostrojenie odległości między kropkami w kierunkach *zigzag* i *armchair* – pozwala przewyciężyć anizotropię i skutkuje przerwą energetyczną (ang. *Nagaoka gap*) sięgającą do 230 μeV , co – zdaniem autorów – daje nadzieję na eksperymentalną obserwację tego efektu. W pracy zbadano również wpływ przesunięcia jednej z kropek oraz jej odstrojenia, pokazując, że zaburzenia geometrii mogą prowadzić do zniesienia porządku ferromagnetycznego.

W piątym, ostatnim z artykułów wchodzących w skład rozprawy (Thakur, T., Peeters, F. M., & Szafran, B., Sci. Rep. 14, 18966 (2024)) analizowana jest możliwość kontroli/sterowania spinem elektronów przy użyciu oscylujących pól elektrycznych (EDSR – *electric dipole spin resonance*) w podwójnych kropkach kwantowych utworzonych w monowarstwie fosforu. Wykorzystując anizotropię masy efektywnej oraz oddziaływanie spin-orbita, autorzy pokazują, że odpowiednie dostrojenie potencjału ograniczającego umożliwia przełączanie między stanami singletowymi i trypletowymi układu. Antykrzyżowanie poziomów przy zmianach odstrojenia prowadzi do występowania maksimów w elementach macierzowych przejść dipolowych, pozwalając na uzyskanie szybkich oscylacji Rabi'ego. Teoretycznie taki układ umożliwia realizację zarówno kubitów typu spinowego (stabilnych wobec szumów ładunkowych), jak i kubitów ładunkowych (o krótkich czasach przełączeń).

JMC

Podsumowując wyniki z pięciu artykułów mogą znaleźć zastosowanie eksperymentalne m.in. w spektroskopii transportowej i teoretycznie mają charakter uniwersalny dla materiałów o anizotropowej masie efektywnej. Mogą mieć też znaczenie dla fizyki kwantowego ułamkowego efektu Halla oraz eksperymentalnej wizualizacji struktur wirowych, a także potwierdzają możliwość eksperymentalnej realizacji i kontrolowania porządku spinowego w układach kropkowych z fosforenu oraz wskazują na szerokie możliwości kontroli dynamiki spinów w fosforenowych strukturach kropkowych. Należy podkreślić jeszcze raz, co zauważają sami autorzy, że są to wyniki teoretyczne, oczekujące na weryfikację eksperymentalną.

W mojej opinii rozprawa jest bardzo dobrze napisana i zawiera szereg interesujących wyników dotyczących aktywnej i przyszłościowej dziedziny badań naukowych. We wstępie rozprawy znalazłem tylko kilka literówek i niefrasobliwości językowych („metoda interakcji konfiguracyjnych”). W części metodologicznej jest też m.in. wprowadzające czytelnika błąd zdanie „*exact diagonalization combined with full configuration interaction*”. Bardzo dobrze oceniam jednakże mocno dydaktyczny charakter wstępu oraz krótki podsumowania każdego z artykułów z osobna. Brakuje mi nieco syntetycznego podsumowania całości wyników. W tym kontekście podsumowanie rozprawy jest nieco zbyt skromne. Kwestie nie umniejszają one jednak w żaden sposób bardzo dobremu poziomowi pracy.

Cztery prace wchodzące w skład rozprawy powstały w duecie doktorant-promotor, a więc w bardzo bliskiej recenzentowi formule uczeń-mistrz, jedynie w piątej pracy był trzeci współautor (jako drugi autor tejże pracy). W każdej z prac wkład doktoranta należy ocenić jako bardzo znaczący, wręcz zasadniczy dla powstania każdego z artykułów (wniosek ten wysnuwam w oparciu o informacje z sekcji *Author Contributions* w pracach w *Scientific Report*, kolejność autorów oraz przybliżone mi przez promotora zasady dotyczące wkładów do publikacji panujące na AGH).

Po lekturze rozprawy mam kilka też następujących pytań/uwag:

- Nie rozumiem twierdzenia doktoranta o tym, że złożoność obliczeniowa metody ciasnego wiązania może uniemożliwiać („*can become prohibitive*”) obliczenia dla dużych układów fosforenowych? O ile w typowych układach 3D (np. w stosach samorosnących kropek kwantowych z milionami atomów w pudle obliczeniowym) można się zgodzić z tą tezą, to dla układów 2D (gdzie są setki/tysiące atomów) trudno się z tym twierdzeniem zgodzić.
- Czy procedura zastąpienia (uzupełnienia) potencjału „W” (omawiana w drugiej pracy) mająca na celu poprawienie zbieżności nie generuje żadnych artefaktów obliczeniowych?
- Jakie są realne perspektywy eksperymentalnej weryfikacji wyników teoretycznych zawartych w rozprawie?

Oprócz powyższych – ze względu na terminologię, moim zdaniem, mniej znaną szerszej społeczności fizyków, proszę o rozwinięcie następujących kwestii:

- W czwartej pracy kandydat (oraz współautorzy) powołuje się na twierdzenie Lieba-Mattisa, czy kandydat do stopnia może krótko (dydaktycznie) rozwinąć ten temat?
- Podobnie: czy może autor omówić na przystępnym poziomie przejścia Landaua-Zenera-Stückelberga-Majoran’y wspomniane w artykule piątym?

Podsumowanie

Przedstawiona przez mgr. Tanmaya Thakura rozprawa doktorska dotyczy aktualnej i ważnej tematyki badań: fizyki nanostruktur dwuwymiarowych. Jest to rozprawa bardzo wartościowa, zwraca uwagę wysoką jakością wyników naukowych oraz klarownością przekazu, biegłością kandydata w wykonywaniu obliczeń naukowych oraz analizie wyników badań numerycznych. Jest udokumentowana pięcioma, bardzo dobrze przeze mnie ocenianymi, recenzowanymi artykułami naukowymi o zasięgu międzynarodowym, stanowiącymi oryginalne rozwiązania problemów naukowych. Doktorant udokumentował rozprawą swoją ogólną i szczegółową wiedzę z zakresu fizyki teoretycznej, a w szczególności z zakresu teoretycznej fizyki nanostruktur. Doktorant udowodnił także zdolności do samodzielnego prowadzenia pracy naukowej, choć oczywiście – na tym etapie kariery – pod opieką promotora.

Podsumowując stwierdzam, że recenzowana rozprawa spełnia wymagania ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach naukowych i tytule naukowym w zakresie sztuki określone w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (z późniejszymi zmianami) i wnioskuję o dopuszczenie jej do dalszych etapów postępowania o nadanie stopnia doktora w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.

Jednocześnie biorąc pod uwagę wkład wniesiony przez doktoranta w badania opisane w rozprawie do rozwoju fizyki oraz w szczególności ze względu na dużą wartość osiągnięć naukowych w artykułach zawartych w rozprawie, zaliczam rozprawę do kategorii wybitnie dobrej i zasługującej na wyróżnienie. Tym samym wnioskuję o uznanie rozprawy doktorskiej pana/pani mgr. Tanmaya Thakura za wyróżniającą się.

prof. dr hab. Michał Zieliński