

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr. Davida Ziemkiewicza zatytułowanej:
“Własności optyczne ekscytonów rydbergowskich w Cu_2O ”, przedstawionej
Radzie Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu
Mikołaja Kopernika w Toruniu**



UNIwersytet
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

1 Uwagi wstępne

Przedstawiona mi do oceny dokumentacja rozprawy habilitacyjnych dr. Davida Grzegorza Ziemkiewicza jest kompletna i zawiera 12 prac oryginalnych, deklaracje współautorów, wykaz innych publikacji habilitanta, autoreferat oraz inne wymagane dokumenty do formalnego przeprowadzenia procedury habilitacyjnej. Scharakteryzuję przede wszystkim dorobek oryginalny i omówię go.

W ogólności, tlenki miedzi oraz niklu i ich pochodne w stanie krystalicznym odgrywają fundamentalną rolę w badaniach nadprzewodnictwa, zwłaszcza wysokotemperaturowego. Te występujące jako jony są szczególnie ciekawe, gdyż wtedy miedź występuje jako jon Cu^{2+} i w takim stanie konfiguracja elektronowa jest $3d^9$. W tej konfiguracji elektronowej układ zawierający takie jony (np. tlenek La_2CuO_4) jest standardowym przykładem izolatora Motta, bo to układ o nieparzystej ilości elektronów na powłoce $3d$, który z punktu widzenia jednoelektronowej struktury pasmowej powinien być metalem. Co więcej, wtedy stan izolatora jest stanem antyferromagnetycznym z momentem magnetycznym odpowiadającym uporządkowaniu spinów o wielkości spinu $S=1/2$ na atom miedzi. Z kolei, tlen w stanie jonowym O^{2-} ma w pełni wypełnioną powłokę $2p^6$. W przypadku Cu_2O jon Cu^+ jest w konfiguracji $3d^{10}$ i tlen w $2p^6$, co oznacza, że cały układ jest klasycznym przypadkiem diamagnetyka w stanie izolatora, gdyż stany typu $3d$ oraz $2p$ są pełne i oddzielane od innych pasm typu $3s$, $3p$, itd. Zachodzi od razu pytanie czy zmiany wartości $\text{Cu}^+ \rightarrow \text{Cu}^{2+}$ lub $\text{O}^{2-} \rightarrow \text{O}^-$ są związane z pojawieniem się silnym korelacji elektronowych, zwłaszcza przy przejściach $\text{Cu}^+ \rightarrow \text{Cu}^{2+}$, co oznaczałoby, że należy wziąć pod uwagę rozszczepienie stanów $3d$ na podpasma Hubbarda? Postaram się to pytanie skomentować po bliższej analizie treści tej rozprawy habilitacyjnej.

2 Analiza oryginalnych prac

Dwanaście prac ([H1]-[H12]), stanowiące przedmiot rozprawy, dotyczy wzbudzeń elektronowych w Cu_2O , a przede wszystkim ich własności elektronowych i nieliniowych, i to zarówno w stanach kropek kwantowych, jak i w grubych warstwach (studniach kwantowych). Szczególną uwagę zwrócono na możliwość obserwacji szczególnego typu efektu Kerra (tzw. self-Kerr effect) oraz na przydatność tych wzbudzeń do konstrukcji masera, wykorzystującego ekscytony utworzone w stanach rydbergowskich. Większość prac (np. poza tą opublikowaną we współpracy z grupą francuską z Ecole Normale Supérieure) to prace teoretyczne, zawie-

Instytut Fizyki Teoretycznej

Zakład Teorii Materii

Skondensowanej i Nanofizyki

Prof. dr hab. Józef Spałek

e-mail:

jozef.spalek@uj.edu.pl

tel.: 12 664-46-85

ul. St. Łojasiewicza 11

PL 30-348 Kraków

rające przede wszystkim dokładną analizę własności nieliniowych tych ekscytónów. Wszystkie prace są opublikowane w renomowanych czasopismach fizycznych, więc nie ma potrzeby recenzować ich jeszcze raz. Warto nadmienić, iż w ośmiu z tych prac habilitant jest pierwszym autorem, a deklaracje współautorów są pod tym kątem jednoznaczne i wskazują na główny wkład habilitanta. Odnoszę zresztą wrażenie, że te 8 prac, w których habilitant jest pierwszym autorem, byłoby wystarczające dla celów tej rozprawy. Zresztą, zauważyłem także, że w części prac w której habilitant nie jest pierwszym autorem, jest autorem korespondencyjnym (por. np. [H2]).

Przechodząc do oceny merytorycznej rozumiem, że rozważanie tylko stanów rydbergowskich oznacza, że bierzemy pod uwagę wyłącznie stany wodoropodobne elektronów i dziur, gdyż ich rozmiar pozwala na założenie, że ich orbity są znacznie większe od odległości międzyatomowych i stąd np. stała dielektryczna może być wzięta taka jak dla ośrodka ciągłego. Także, o ile tylko rozmiary ekscytónów są zdecydowane mniejsze niż np. grubość rozważanych warstw, gdyż wtedy można zaniedbać efekty powierzchniowe. Czy mam rację? Nie rozumiem jednak, dlaczego autorzy piszą, że ekranowanie oddziaływania kulombowskiego elektron-dziura jest anizotropowe. Czy wynika to z anizotropowej struktury krystalicznej czy warstwowej makro? Poza tym, w pracy [H3] autorzy uważają, że obliczenia dotyczące magneto-ekscytónów są wykonane dla dowolnej wielkości pola magnetycznego statycznego, a w hamiltonianie ekscytónowym (por. równ. (3)-(4)) nie jest uwzględniona część zeemanowska energii tych cząstek. Czy oznacza to, że energia wiązania nawet tak dużych ekscytónów w polu jest dużo większa, niż energia Zeemana momentów magnetycznych elektronów i dziury?

Na temat opisu emisji wymuszonej na bazie przejść pomiędzy stanami ekscytónów rydbergowskich (prace [H1] oraz [H5]), w oparciu o podejście Einsteina i makroskopowe równania kinetyczne dla obsadzeń nie wypowiadam się, gdyż nie mam wycucia (ani praktyki), jak istotne są tutaj poszczególne etapy obliczeń. Jednakże, dwie prace (w *Optics Letters* i *Optics Express*, odpowiednio) są dla mnie wystarczającym argumentem, że są one oryginalne i wartościowe.

Seria prac [H6]-[H10] stanowi, moim zdaniem, drugi z głównych wyników oryginalnych habilitanta i dotyczy układów nanofizycznych: kropek oraz studni kwantowych. Prace te dotyczą zastosowania tych samych metod podejścia do obliczeń funkcji falowej oraz energii wiązania ekscytónów rydbergowskich (i innych charakterystyk), z uwzględnieniem odpowiednich warunków brzegowych na powierzchni tych układów. Obliczenia te służą w dalszym kroku do wyznaczenia współczynników absorpcji. Należy nadmienić, że uwzględniono tutaj sprzężenie pola elektronowego i dziurowego do pola elektrycznego, promieniowania elektromagnetycznego, co pozwala na wyznaczenie kształtu linii absorpcyjnej, która jest superpozycją linii lorentzowskich, a także rozważenia stanów polarytonowych

w tych układach. Ponownie, jak rozumiem, propagacja polarytonu i stany ekscytonowe dotyczą jedynie stanów objętościowych (tj. bez powierzchniowych), gdyż albo warunki brzegowe, albo rozmiar układu pozwalają na zaniedbanie tych ostatnich. Czy mam tutaj rację?

3. Uwagi ogólne

Uwaga 1: Zastanawia mnie fakt, że do teoretycznej analizy wystarczy obraz atomu rydbergowskiego jako wodoropodobnego. W ogólności, przejścia optyczne w tym układzie ze stanu $3d^{10}$ dla Cu^+ i $2p^6$ dla O^{2-} to musi być w języku atomowym przejście typu $3d \rightarrow 3p$ lub $2p \rightarrow 4s$. Rozumienie tych przejść jako przejść międzypasmowych jest chyba niezbyt dokładnym opisem, gdyż stany $3d^9$ są stanami z górnego podpasma Hubbarda. Jak można pogodzić opis przez stany rydbergowskie z opisem powyższym? Oczywiście, stan wzbudzony jest mieszaniną stanu $3d^9 2p^6$ oraz $3d^{10} 2p^5$, czy tak?

Uwaga 2: Pytania zawarte w recenzji mogą być przedmiotem dyskusji z habilitantem w czasie kolokwium. Jeśli procedura nie przewiduje takiej możliwości to mogą być zignorowane, gdyż dotyczą bardziej mojej ciekawości i mają marginalne znaczenie dla mojej oceny tej rozprawy.

4. Podsumowanie

Przedstawione mi do oceny oryginalne prace, stanowiące rozprawę habilitacyjną, świadczą o solidnym dorobku monograficznym, obejmującym rydbergowskie stany ekscytonowe w różnych układach fizycznych. Głównymi oryginalnymi osiągnięciami habilitanta są:

- (i) Zbadanie wpływu pól zewnętrznych, elektrycznego i magnetycznego, na stany ekscytonowe, także z analizą rozkładu chaotycznego odległości energetycznej pomiędzy poziomami wzbudzonymi;
- (ii) Dokładna analiza stanów ekscytonowych w kropkach i studniach kwantowych;
- (iii) Zaproponowanie idei masera na stanach rydbergowskich ekscytonów.

Wszystkie prace zostały odniesione do własności związku Cu_2O , wykazującego silne własności nieliniowe.

Prace te są przygotowane starannie z wykorzystaniem metod w postaci zaawansowanej formy równania Schrödingera dla dwóch cząstek oddziałujących kulombowsko oraz formalizmu Stahla z użyciem macierzy gęstości (formalizm RDMA), które były sformułowane w zespole habilitanta i włączają analizę numeryczną oraz, w niektórych przypadkach, szczegółowe porównanie ilościowe z danymi doświadczalnymi. Wkład habilitanta w proces powstawania i publikowania

prac wynikających z tych badań jest oryginalny i niezaprzeczalny. *Dorobek ten stanowi osiągnięcie naukowe dające znaczny wkład w rozwój fizyki jako dyscypliny naukowej, w zakresie badań teoretycznych, a także doświadczalnych.* Także, pozostały dorobek habilitanta, niestanowiący przedmiotu rozprawy, nie pozostawia dla mnie żadnych wątpliwości. Całościowo, dorobek ten spełnia warunki odpowiedniej ustawy „*Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce*”. W związku z tym wnioskuję o przyjęcie tej rozprawy i podjęcie dalszych kroków w procedurze nadania Panu dr. Davidowi Grzegorzowi Ziemkiewiczowi stopnia doktora habilitowanego nauk fizycznych w dyscyplinie fizyka. Także, dane bibliometryczne osiągnięć habilitanta są dobre i mieszczą się w zakresie kryteriów zwyczajowych przy nadawaniu stopnia doktora habilitowanego w naszej dziedzinie. Nawiasem mówiąc, zamieszczony szczegółowy wykaz cytujących go prac uważam za niepotrzebny, gdyż jest to po prostu strata cennego czasu pracownika uczelni, który obejmuje w tym przypadku zajęcia dydaktyczne i prace popularyzatorskie. Te ostatnie oceniam także bardzo pozytywnie. Udział w konferencjach naukowych jest znaczący.

Kraków, dn. 2 stycznia 2024 r.

Józef Spątek
profesor zwyczajny nauk fizycznych