



Prof. dr hab. Tomasz Sowiński
Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk
Aleja Lotników 32/46, 02-668 Warszawa
tomasz.sowinski@ifpan.edu.pl

Warszawa, 9 września 2024 r.

**Recenzja rozprawy doktorskiej pani mgr Martyny Zuzanny Patery
pt. „Atomistyczna teoria własności widmowych kropek kwantowych
definiowanych fazą krystaliczną”**

Przedłożona do oceny rozprawa doktorska pani mgr Martyny Patery została przygotowana na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu pod kierunkiem dra hab. Michała Zielińskiego, prof. UMK. Dysertacja jest napisana w języku polskim, jest czytelnie podzielona jest na siedem rozdziałów i zawiera alfabetycznie ułożoną bibliografię zawierającą siedemdziesiąt dwie pozycje. Czyniąc zadość przepisom ustawowym praca jest także opatrzona streszczeniem w języku polskim i angielskim. Najważniejsza część rozprawy, zawierająca oryginalne wyniki naukowe, oparta jest na dwóch artykułach opublikowanych wspólnie z promotorem w *Physical Review B* i *Scientific Reports*. Nie ulega zatem wątpliwości, że materiał zawarty w tych publikacjach, a co za tym idzie również w rozprawie doktorskiej, to wynik intensywnego i bardzo dobrego kształcenia w, niestety coraz rzadziej spotykanym, systemie „mistrz-uczeń”. Szczególnego podkreślenia zasługuje przy tym fakt, że pierwsza praca w prestiżowym *Phys. Rev. B* oprócz tego, że została opublikowana jako list (Letter) to dodatkowo uzyskała szczególną rekomendację od edytorów (Editors' suggestion). To oznacza, że uzyskane wyniki zostały dostrzeżone przez środowisko fizyków materii skondensowanej już na etapie recenzji w czasopiśmie.

Rozprawa mgr Patery jest pracą czysto teoretyczną. Niemniej jednak jest ona bardzo mocno inspirowana współczesnymi doświadczeniami nad spektroskopowymi własnościami specyficznych kropek kwantowych powstających na skutek łączenia materiału półprzewodnikowego znajdującego się w różnych fazach krystalicznych. Już od pierwszych akapitów rozprawy widoczna jest bardzo duża chęć zbliżenia się z rozważanym modelem teoretycznym do realiów doświadczalnych. Doktorantka precyzyjnie określa parametry fizyczne badanego materiału półprzewodnikowego wprost w mierzalnych doświadczalnie jednostkach i w takich też prezentuje wszystkie wyniki. To na pewno jest bardzo duży walor rozprawy, bo znacznie zwiększa szanse, że zostanie ona dostrzeżona również przez doświadczalników. Zasadniczym celem pracy jest znalezienie takiego opisu teoretycznego, który z jednej strony będzie odpowiednio czuły na atomistyczną strukturę materiału i tym samym będzie zgodny z mierzalnymi własnościami kropek kwantowych, a z drugiej będzie na tyle uproszczony, aby możliwe było przeprowadzenie numerycznie ścisłych rachunków dla bardzo wielu ciał. Jest to kierunek badań z powodzeniem rozwijany od wielu lat przez profesora

Zielińskiego i jego współpracowników, a recenzowana rozprawa jest kolejnym bardzo ciekawym rozszerzeniem dotychczasowych narzędzi na zjawiska zachodzące w kropkach kwantowych powstających na granicy faz krystalicznych.

Rozprawę rozpoczyna bardzo krótki rozdział wprowadzający, który w sposób dość zgrabny zanurza czytelnika w poruszanej problematyce i formułuje jej podstawowe cele. Następnie w rozdziale 2. doktorantka robi dość dokładny, ale dobrze zbalansowany przegląd teoretycznego opisu układów półprzewodnikowych koncentrując się najpierw na efektywnym opisie jednociąłowym w ramach przybliżenia ciasnego wiązania. Tak powstająca baza jest podstawą modelu wielociąłowego, której centralnym punktem jest numerycznie ścisła diagonalizacja hamiltonianu wielociąłowego (w rozprawie nazywana konsekwentnie metodą oddziaływania konfiguracji). Rozdział kończy się pierwszym wskazaniem jaki jest związek otrzymanych w wyniku takiej procedury stanów i energii własnych z widmem optycznym obserwowalnym w doświadczeniu. Rozdział 3. jest rozszerzającą kontynuacją poprzedniego, w którym wszystkie elementy stosowanego później schematu teoretycznego uwzględniającego zjawiska wielociąłowe są uporządkowane i szczegółowo wyjaśnione. Tym sposobem rozprawa mgr Patery jest nie tylko pracą zawierającą oryginalne wyniki naukowe, ale posiadającą również walory dydaktyczne. W tym przypadku jest to o tyle istotne, że dało możliwość doktorantce do dodatkowego odwołania się do prac innych autorów i wskazania pewnych rozbieżności w istniejącej już literaturze.

Centralnym elementem wprowadzającym do oryginalnych wyników naukowych stanowiących podstawę rozprawy doktorskiej jest rozdział 4. To właśnie w tym rozdziale autorka argumentuje, że dokładność metody ścisłej diagonalizacji hamiltonianu wielociąłowego można istotnie zwiększyć poprzez odpowiednią modyfikację stanów jednociąłowych. Przekonanie to wynika wprost z zauważenia, że efektywne oddziaływanie kulombowskie elektronów i dziur jest dominującym elementem, który wpływa na profil gęstości ich przestrzennego rozkładu. Oczywiście takie oddziaływanie prowadzi również do nietrywialnych nieklasycznych korelacji, których nie sposób uchwycić na poziomie jednociąłowym. Niemniej jednak ten dominujący efekt, tzn. zmiana kształtu rozkładu gęstości, może być z łatwością uwzględniona poprzez odpowiednią modyfikację metody ciasnego wiązania. Doktorantka proponuje tutaj podejście najbardziej intuicyjne, tzn. na poziomie jednociąłowym użycie rozkładu gęstości elektronów jako generującego dodatkowy efektywny potencjał dla dziur i *vice versa*. Tym sposobem można łatwo sformułować sprzężone równania jednociąłowe, które rozwiązuje się iteracyjnie, aż do uzyskania zbieżności. Jak pokazuje ewidentnie rysunek 4.3 zastosowana metoda jest dość szybko zbieżna, a wyliczone energie jednociąłowe są istotnie zmodyfikowane w stosunku do „gołych” energii jednociąłowych. Jest to szczególnie dobrze widoczne w przypadku stanów dziurowych, których energia jednociąłowa dla niektórych stanów może nawet zmienić znak. Oprócz wskazania jak zmieniają się energie przy kolejnych iteracjach, bardzo pouczające byłoby pokazanie jak zmieniają się wyznaczone stany

jednociałowe. Można byłoby to zrobić np. poprzez wykreślenie wartości kwadratu iloczynu skalarnego (*overlap*) pomiędzy stanem wyznaczonym w danej iteracji, a stanem wziętym jako inicjujący pierwszą iterację (stan bez uwzględnienie oddziaływań). Można bowiem sobie wyobrazić sytuację, w której pomimo istotnej zmiany energii własnych, nie następuje istotna zmiana samych orbitali. Wtedy stwierdzenie, że oddziaływania elektron-dziura zmieniają kształt rozkładów gęstości nie byłby do końca uzasadniony. Szkoda, że doktorantka nie pokusiła się w tym miejscu na taką pogłębioną analizę, której wykonanie nie wydaje się bardzo trudne.

Rozdziały 5. i 6. zawierają oryginalne i już opublikowane wyniki naukowe uzyskane dzięki zastosowaniu opisanego wcześniej podejścia numerycznego. Najważniejszym wynikiem w pierwszym z nich jest sformułowanie przewidywania, że przy odpowiednich parametrach geometrycznych kropki kwantowej powstającej na granicy faz krystalicznych wurcytu i blendy cynkowej może dojść do zmiany charakteru stanu podstawowego z wiążącego na antywiązący po stronie dziurowej. Wykonane obliczenia pozwoliły autorce na dokładne zbadanie tego efektu w funkcji wysokości i średnicy obszaru kropki i tym samym na wykreślenie dość precyzyjnego diagramu fazowego. Cała analiza jest jeszcze uzupełniona o zbadanie zależności tego efektu (i tym samym obserwowalnych własności optycznych) od wzajemnego przesunięcia pasm walencyjnych oraz od ewentualnych odkształceń, którym poddawana jest cała struktura na skutek niedopasowania stałych sieci. W moim odczuciu wyniki przedstawione w rozdziale 5. są bardzo ciekawe i niewątpliwie naukowo wartościowe. Nic więc dziwnego, że zostały one przyjęte entuzjastycznie przez edytorów *Physical Review B*.

W rozdziale 6. swojej rozprawie mgr Patera koncentruje się na nieco innym aspekcie wynikającym wprost z natury geometrycznej struktury krystalicznej wurcytu i jego niedopasowania do struktury blendy cynkowej. Pierwszy z nich jest bezpośrednią konsekwencją istniejącego, aczkolwiek często pomijanego, rozszczepienia energetycznego orbitali typu p w wurcytynie. Przeprowadzona analiza numeryczna wskazuje, że uwzględnienie tego elementu może w pewien sposób wpływać na własności emisyjne kropek kwantowych. Drugi efekt wynika wprost z nieznacznego, ale permanentnego wzajemnego przesunięcia jonów tworzących sieć wurcytu (tzw. spontaniczna polaryzacja) i tym samym nieznikającego wewnętrznego pola elektrycznego w całym nanodrucie. Oczywiście należy się spodziewać, że dodatkowe pole elektryczne będzie miało wpływ na aktywność optyczną ekscytonów, a podrozdział 6.2 jest dokładną jakościową analizą tego zjawiska. Wyniki przedstawione w całym rozdziale 6. odczytuję raczej jako kolejny, bardzo ciekawy koncepcyjnie krok w kierunku lepszego zrozumienia zjawisk indukowanych niedopasowaniem geometrycznym struktur krystalicznych niż konkluzywne rozstrzygnięcie różnych niejasności wciąż podnoszonych w literaturze. Jednak sam fakt podejmowania przez doktorantkę nieco trudniejszych i bardziej ryzykownych kierunków badań należy oczywiście docenić.

Biorąc pod uwagę całą rozprawę doktorską mgr Patery chciałbym podkreślić, że jest ona napisana bardzo starannie i przejrzyście. Choć nie podlega to ocenie merytorycznej, to warto zwrócić też uwagę na bardzo dobrze dobraną dynamikę językową przedstawianych wywodów. Doktorantka z jednej strony posługuje się bardzo precyzyjnym językiem i wskazuje na najważniejsze elementy, które pozwalają czytelnikowi podążać za rozumowaniem. Z drugiej natomiast nie przeciąża go zbędnymi detalami i drobiazgowymi wyprowadzeniami, które niepotrzebnie mogłyby być nużące. Ta rozprawa jest bardzo dobrym przykładem publikacji naukowej, która odpowiednio wypełnia miejsce pomiędzy szczegółowym podręcznikiem akademickim, a specjalistycznym artykułem naukowym zawierającym jedynie suche wyniki naukowe. Istnieje oczywiście kilka drobnych elementów, które mogłyby być poprawione, ale mają one raczej charakter edytorski i choć czasami prowadzą do pewnego rozbawienia czytelnika, to nie wpływają istotnie na ocenę merytoryczną. Do najbardziej jaskrawych przykładów należą: niepotrzebne stosowanie amerykańizmów „interakcje” i „system” zamiast polskich słów „oddziaływanie” i „układ”, a także powtarzające się błędne nazywanie brył geometrycznych, tj. sześcianu „sześcianiem foremnym”, a graniastosłupa „prostopadłościanem”. Niezbyt fortunnym jest również używanie skrótów w tytułach rozdziałów i podrozdziałów, a także brak numerowania wszystkich wzorów. Do dość specyficznej i rzadko spotykanej alfabetycznej formy prezentowania bibliografii również nie jest łatwo się przyzwyczaić.

Podsumowując swoją recenzję chcę z całym przekonaniem stwierdzić, że rozprawa doktorska mgr Martyny Z. Patery świadczy, że doktorantka bardzo dobrze opanowała warsztat metod numerycznych pozwalających na przeprowadzenie bardzo subtelnych rachunków, które z kolei doprowadziły do dość kompleksowego i bardzo zbliżonego do realiów doświadczalnych opisu zjawisk zachodzących w kropkach kwantowych powstających na styku faz krystalicznych. Kompozycja pracy, która zawiera zarówno bardzo dobrze napisane rozdziały wprowadzające jak i przejrzysty opis oryginalnych wyników, przekonują mnie, że mgr Patera ma głęboką wiedzę specjalistyczną zarówno w zakresie aspektów fenomenologicznych jak i technicznego wykorzystania narzędzi do numerycznego modelowania układów półprzewodnikowych. Nie mam zatem wątpliwości, że rozprawa spełnia zarówno zwyczajowe warunki merytoryczne jakie stawiane są rozprawom doktorskim w zakresie fizyki teoretycznej jak i wymagania formalne zawarte w obowiązujących przepisach ustawowych dotyczących postępowań w sprawie nadawania stopnia naukowego doktora, a także w przepisach szczegółowych określonych przez Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu. Dlatego wnioskuję o dopuszczenie pani mgr Martyny Zuzanny Patery do dalszych etapów postępowania prowadzącego do uzyskania przez nią pierwszego stopnia naukowego w zakresie nauk ścisłych i przyrodniczych w zakresie fizyki.

