

Załącznik 2A

(na podstawie wzoru autoreferatu będącego załącznikiem do Komunikatu nr. 6/2011 Centralnej Komisji ds. Stopni i Tytułów)

AUTOREFERAT

dr Tomasz Kwapiński

Spis treści:

1. Dane personalne	2
2. Wykształcenie, posiadane dyplomy, stopnie naukowe	2
3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu	3
4. Wskazanie osiągnięcia naukowego	3
a) Tytuł osiągnięcia naukowego	3
b) Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego	4
c) Omówienie celu naukowego prac	6
5. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo - badawczych	29
a) Przed uzyskaniem stopnia doktora	29
b) Po uzyskaniu stopnia doktora	30

Lublin 13.03.2014

1. Dane personalne

imię i nazwisko: Tomasz Kwapiński

narodowość: polska

stanowisko i stopień naukowy: adiunkt, doktor

zatrudnienie: Zakład Fizyki Powierzchni i Nanostruktur,
Instytut Fizyki (IF),
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki,
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej (UMCS) w Lublinie

2. Wykształcenie, posiadane dyplomy, stopnie naukowe/ artystyczne – z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej.

- 1993r. **matura** w II Liceum Ogólnokształcącym im. Tadeusza Kościuszki w Sandomierzu, w klasie o profilu matematyczno-fizycznym.
- 1998r. **stopień magistra fizyki** w zakresie fizyki teoretycznej uzyskany z wyróżnieniem na Wydziale Matematyki i Fizyki UMCS po ukończeniu studiów magisterskich w latach 1993-1998;
praca magisterska pt. „*Wpływ korelacji elektronowych na wymianę ładunku w zderzeniach atomów z powierzchnią*” wykonana w Zakładzie Teorii Fazy Skondensowanej Instytutu Fizyki UMCS pod kierunkiem prof. dr. hab. Ryszarda Taranko.
- 1999r. **stopień magistra matematyki** uzyskany z wynikiem bardzo dobrym na Wydziale Matematyki i Fizyki UMCS po ukończeniu studiów magisterskich w latach 1995-1999;
praca magisterska pt. „*Niektóre zastosowania calek zespolonych*” wykonana w Zakładzie Funkcji Analitycznych Instytutu Matematyki UMCS pod kierunkiem dr. hab. Józefa Waniurskiego.
- 2002r. **stopień doktora nauk fizycznych** (specjalność: fizyka ciała stałego) uzyskany na Wydziale Matematyki i Fizyki UMCS po ukończeniu studiów doktoranckich w latach 1998-2002;
praca doktorska pt. „*Transport elektronowy w układach z kropką kwantową*” wykonana w Zakładzie Teorii Fazy Skondensowanej IF UMCS pod kierunkiem prof. dr. hab. Ryszarda Taranko; recenzenci rozprawy: prof. dr. hab. Karol I. Wysokiński (IF UMCS) oraz prof. dr. hab. Bogdan R. Bułka (IFM PAN, Poznań).

3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych i artystycznych.

1998-2002	studia doktoranckie na Wydziale Matematyki i Fizyki UMCS w Lublinie
II 2003 - obecnie	adiunkt Zakład Fizyki Powierzchni i Nanostruktur, Instytut Fizyki, Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki, UMCS w Lublinie
X 2007-IX 2008	postdoc Instytut Fizyki, Uniwersytet Augsburgski, Augsburg, Niemcy, w ramach stypendium Humboldta.

4. Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.)

Zgłaszany przeze mnie osiągnięciem naukowym jest jednotematyczny cykl 16 prac, w tym 8 prac samodzielnych, które powstały po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych. Wszystkie prace zostały opublikowane w czasopismach znajdujących się w bazie Journal Citation Report (JCR): 4 w Physical Review, 7 w Journal of Physics: Condensed Matter oraz po jednej w Physica Status Solidi, Surface Science, Physics Letters A, Physica E, European Physical Journal B.

a) tytuł osiągnięcia naukowego/artystycznego:

Przewodnictwo elektryczne i fale ładunku w łańcuchach atomowych.

b) publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego

Nr	Autor/autorzy, tytuł, czasopismo, tom, strony, data wydania	impact factor
H1	T. Kwapiński , "Time-dependent electron transport through a quantum wire", Phys. Rev. B 69 , 153303 1-4 (2004).	3,07
H2	T. Kwapiński , "Conductance oscillations of a metallic quantum wire", J. Phys.: Condens. Matter 17 5849-5858 (2005).	2,15
H3	M. Krawiec, T. Kwapiński , M. Jałochowski, "Scanning tunneling microscopy of monoatomic gold chains on vicinal Si(335) surface: experimental and theoretical study", Phys. Stat. Sol. B, 242 , 332-336 (2005).	0,84
H4	M. Krawiec, T. Kwapiński , "Electron transport through a strongly correlated monoatomic chain", Surface Science 600 , 1697-1701 (2006).	1,88
H5	T. Kwapiński , "Charge fluctuations in a perfect and disturbed quantum wire", J. Phys.: Condens. Matter 18 , 7313-7326 (2006).	2,04
H6	M. Krawiec, T. Kwapiński , M. Jałochowski, "Double nonequivalent chain structure on a vicinal Si(557)-Au surface", Phys. Rev. B 73 , 075415 1-8 (2006).	3,11
H7	T. Kwapiński , "Conductance oscillations of a quantum wire disturbed by an adatom", J. Phys.: Condens. Matter 19 , 176218-176227 (2007).	1,89
H8	T. Kwapiński , M. Krawiec, M. Jałochowski, "STM tunneling through a quantum wire with a side-attached impurity", Physics Letters A 372 , 154-161 (2008).	2,17

H9	T. Kwapiński , S. Kohler, P. Hänggi, „ <i>Discontinuous conductance of bichromatically ac-gated quantum wires</i> ”, Phys. Rev. B. 79 , 155315 1-6 (2009).	3,47
H10	T. Kwapiński , S. Kohler, P. Hänggi, ” <i>Electron transport across a quantum wire in the presence of electron leakage to a substrate</i> ”, Eur. Phys. J. B 78 , 75-81 (2010).	1,57
H11	T. Kwapiński , ” <i>Conductance oscillations and charge waves in zigzag shaped quantum wires</i> ”, J. Phys.: Condens. Matter 22 , 295303 1-9 (2010).	2,33
H12	T. Kwapiński , ” <i>Tip apex charged states in tunneling spectroscopy</i> ”, Physica E 43 , 333-337 (2010).	1,30
H13	T. Kwapiński , R. Taranko, ” <i>Spin and charge pumping in a quantum wire: the role of spin-flip scattering and Zeeman splitting</i> ”, J. Phys.: Condens. Matter 23 , 405301 1-11 (2011).	2,54
H14	T. Kwapiński , ” <i>Phase-dependent electron transport through a quantum wire on a surface</i> ”, J. Phys.: Condens. Matter 24 , 055302 1-8 (2012).	2,35
H15	T. Kwapiński , R. Taranko, ” <i>Quantum wire as a charge qubit detector</i> ”, Phys. Rev. A 86 , 052338 1-9 (2012).	3,04
H16	T. Kwapiński , ” <i>Electronic properties of a quantum wire interacting with a surface: the role of periodically placed impurities</i> ”, J. Phys.: Condens. Matter 25 , 415304 1-7 (2013).	2,35 (za 2012r.)
	Sumaryczny <i>impact factor (if)</i> dla wymienionych prac [H1-H16]:	36,1
	Sumaryczny <i>if</i> w przeliczeniu na ilość autorów publikacji:	24,9
	Współczynniki <i>if</i> podałem korzystając z bazy http://apps.webofknowledge.com	

c) omówienie celu naukowego/artystycznego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania.

Wstęp

Po uzyskaniu w roku 2002 stopnia doktora nauk fizycznych rozpocząłem pracę na stanowisku adiunkta w Instytucie Fizyki UMCS w Lublinie. Zostałem zatrudniony w Zakładzie Fizyki Powierzchni i Nanostruktur, którym kieruje prof. dr hab. Mieczysław Jałochowski. Zakład specjalizuje się w badaniach eksperymentalnych układów niskowymiarowych, m.in. atomowych drutów kwantowych i cienkich warstw. Z racji moich zainteresowań i doświadczenia jakie nabyłem podczas studiów doktorskich przy badaniach teoretycznych transportu elektronowego przez kropkę kwantową, postanowiłem zająć się badaniem zjawisk transportowych w układach jedno i dwuwymiarowych. Kluczowe w tej materii były prace dotyczące formowania się nanodrutów kwantowych na różnych powierzchniach anizotropowych, [M. Jałochowski, E. Bauer, *Progr. Surf. Sci.* **67**, (2001) 79; *Surf. Sci.* **480**, (2001) 109], oraz publikacja, która ukazała się w roku 2003, [R. Smit *et al.*, *Phys.Rev.Lett.* **91**, (2003) 076805], poświęcona eksperymentalnym badaniom oscylacji przewodnictwa elektrycznego w łańcuchach atomowych otrzymanych metodą mechanicznego, kontrolowanego łamania złącza (MCBJ - mechanically controlled break junction). W tej ostatniej pracy pokazano, że przewodnictwo układu złożonego z parzystej liczby atomów Au jest zawsze mniejsze od przewodnictwa łańcucha o nieparzystej liczbie węzłów, co prowadzi do skokowych zmian wartości przewodnictwa elektrycznego mierzonego w funkcji długości łańcucha, N , z okresem równym dwa atomy. Zjawisko to nosi nazwę parzysto-nieparzystych oscylacji przewodnictwa i ma związek z kwantowym efektem rozmiarowym obserwowanym np. w trakcie epitaksji cienkich warstw metali. W związku z nowoodkrytym zjawiskiem oscylacji przewodnictwa w drutach kwantowych zadałem sobie wiele pytań, na które nie znalazłem odpowiedzi w literaturze, np. czy możliwe jest uzyskanie oscylacji nieparzysto-parzystych przewodnictwa? W jakich warunkach, i czy w ogóle, mogą wystąpić oscylacje z okresem większym niż dwa węzły? Jakie modyfikacje tego zjawiska wystąpią dla łańcuchów nie prostoliniowych np. typu zig-zag lub dla stabilnych łańcuchów wytworzonych na różnych powierzchniach? Czy rozkład ładunku wzdłuż takiego łańcucha jest jednorodny i jaki wpływ na przewodnictwo i rozkład ładunku mają zaburzenia zewnętrzne łańcucha (domieszki, pola zależne od czasu)?

Podczas mojej pracy naukowej najwięcej czasu poświęciłem badaniom teoretycznym przewodnictwa elektrycznego układów jednowymiarowych poszukując odpowiedzi m.in. na postawione powyżej pytania. Badania prowadzone były równoległe dla układów w polach stacjonarnych, jak również w obecności zależnych od czasu zaburzeń zewnętrznych.

Analizowałem przewodnictwo elektryczne wzdłuż łańcuchów atomowych oraz w konfiguracji STM (prostopadłej do łańcuchów). Badania te zostały opublikowane w czasopiśmie znajdującym się w bazie JCR i wchodzi w skład mojego osiągnięcia naukowego będącego podstawą do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego. Warto podkreślić, że dużą część tych badań przeprowadziłem samodzielnie – w 8 publikacjach jestem jedynym autorem.

Cel naukowy badań

Najcieńszymi z możliwych przewodników prądu elektrycznego są atomowe druty kwantowe. Łańcuchy atomowe otrzymywane metodą MCBJ w temperaturach helowych są bardzo niestabilne i ulegają zerwaniu w końcowej fazie rozciągania. Z tego właśnie względu nie mogą być wykorzystywane w nanoelektronice. Badania eksperymentalne przeprowadzone w zakładzie, w którym pracuję wskazują, że bardzo długie, stabilne i niezwykle regularne łańcuchy atomowe mogą być wytwarzane na powierzchniach schodkowych np. krzemu [H3, H6] w temperaturach azotowych lub wyższych (numeracja publikacji zgodnie z załącznikiem nr 3). Takie łańcuchy są idealnym kandydatem na elementy obwodów w nanoelektronice. Jednowymiarowe układy przewodzące prąd elektryczny mogą być również budowane na bazie sztucznych atomów – kropek kwantowych, których parametry takie jak geometria, położenia poziomów energetycznych, sprzężenia pomiędzy kropkami, są w pełni kontrolowane przy pomocy zewnętrznych elektrod.

Podstawowym celem naukowym moich badań było określenie jaki wpływ na własności elektryczne stabilnych łańcuchów atomowych mają podłoża (izolatory, półprzewodniki, podłoża przewodzące) oraz zbadanie, jaką rolę w przewodnictwie takich układów odgrywają domieszki i zaburzenia zewnętrzne. Te ostatnie, szczególnie dla długich łańcuchów, są nieuniknione i w rzeczywistych układach zawsze występują (np. obce atomy, dyslokacje) lub są wprowadzane poprzez pola zewnętrzne, najczęściej zależne od czasu (np. promieniowanie mikrofalowe, zmienne w czasie napięcia). W szczególności analizowałem zjawisko oscylacji przewodnictwa elektrycznego w takich układach, powstawania fal ładunkowych oraz przepływu ładunku wzdłuż i w poprzek łańcuchów (atomowych drutów kwantowych czy układów sztucznych atomów). Okazuje się, że regularnie rozmieszczone zaburzenia w łańcuchach atomowych prowadzą do pojawienia się przerwy energetycznej w układzie. Z kolei periodyczne w czasie zaburzenia odpowiadają za złamanie symetrii gęstości stanów układu i wygenerowanie prądów ładunkowych i spinowych. Mają więc one decydujący wpływ na możliwości aplikacyjne takich układów. W badaniach uwzględniłem także efekty lokalizacji elektronów w podłożu, na którym wytworzony został łańcuch atomowy.

Skrótowy opis najważniejszych wyników

Publikacje będące osiągnięciem naukowym [H1-H16] wymienione są w kolejności chronologicznej, zgodnie z rokiem opublikowania. Badania zjawisk zależnych i niezależnych od czasu w drutach kwantowych prowadzone były równolegle więc dla jasności przekazu rozdzieliłem dyskusję wyników tych badań. W referacie prezentującym moje badania zjawiska stacjonarne (niezależne od czasu) w łańcuchach atomowych będą omówione jako pierwsze (część A). W dalszej kolejności przedstawię najważniejsze wyniki z prac dotyczących układów jednowymiarowych poddanych działaniu zmiennych w czasie zaburzeń (część B). Ponieważ autoreferat nie jest rozprawą naukową zrezygnowałem z cytowania innych badań literaturowych (z jednym wyjątkiem) – zawarte są one w bibliografiach omawianych publikacji autorskich.

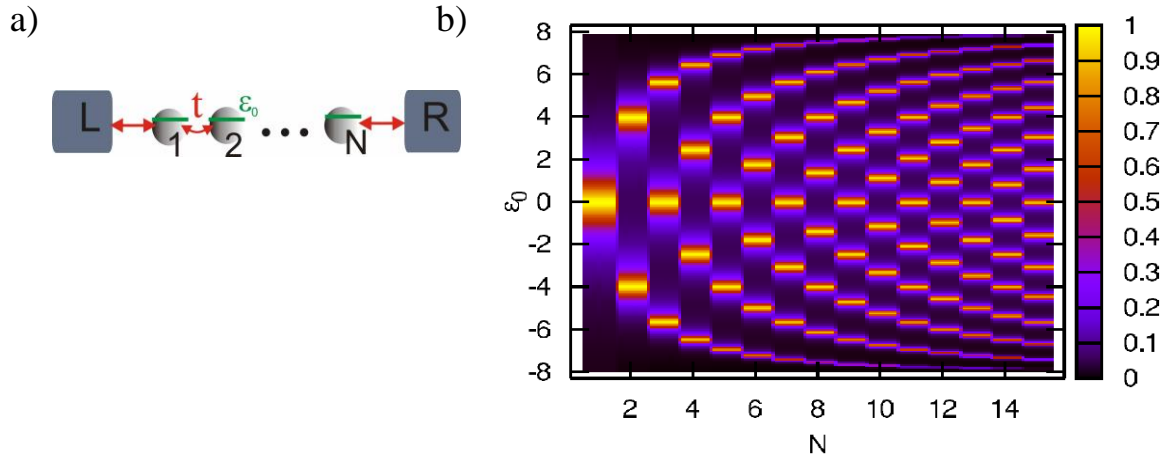
Część A: Zjawiska stacjonarne

Publikacja [H2] zawiera wyniki badań, jakie prowadziłem po doktoracie w latach 2003-2004 i dotyczy stacjonarnego (niezależnego od czasu) transportu elektronowego wzdłuż drutu kwantowego złożonego ze sprzężonych węzłów sieci, np. kropek kwantowych czy atomów w konfiguracji pokazanej schematycznie na rys. 1a. Szczególny nacisk położyłem na zjawisko oscylacji przewodnictwa (zmian wartości przewodnictwa elektrycznego łańcucha w funkcji jego długości). Było to zagadnienie dość nowe, słabo jeszcze poznane w literaturze, w której dopiero w 2003 roku pojawia się pierwsza praca eksperymentalna wskazująca na istnienie oscylacji parzysto-nieparzystych przewodnictwa elektrycznego w łańcuchach złota (R. Smit *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 076805) tzn. dla łańcucha złożonego z parzystej liczby węzłów przewodnictwo jest znacznie mniejsze w porównaniu z łańcuchem posiadającym nieparzystą liczbę węzłów. Mówimy wtedy, że przewodnictwo elektryczne wykazuje oscylacje w funkcji długości łańcucha z okresem równym dwa atomy. Zastanawiałem się wówczas czy możliwe jest wystąpienie oscylacji przewodnictwa z inną okresowością niż dwa węzły. Wykonałem więc obliczenia transmitancji przez drut kwantowy wykorzystując hamiltonian ciasnego wiązania oraz formalizm nierównowagowych funkcji Greena (przewodnictwo liniowe jest wprost proporcjonalne do transmitancji układu) i wyprowadziłem warunek jaki musi być spełniony, aby zaobserwować oscylacje przewodnictwa w funkcji długości łańcucha o dowolnej okresowości, M :

$$\cos(\pi l / M) = \frac{E_F - \varepsilon_0}{2t} , \quad (1)$$

gdzie E_F jest energią Fermiego układu, ε_0 energią stanów elektronowych na poszczególnych węzłach drutu, t – całką przeskoiku pomiędzy najbliższymi węzłami, a M okresem oscylacji przewodnictwa ($l = 1, \dots, M - 1$). Warunek ten określa, jakie muszą być położenie poziomów energetycznych łańcucha względem poziomu Fermiego i wartości całek przeskoiku między

węzłami sieci, aby przewodnictwo elektryczne wykazywało oscylacje z okresem M węzłów. Na przykład oscylacje parzysto-nieparzyste (z okresem równym 2 węzły) obserwujemy dla układu, w którym poziomy energetyczne poszczególnych węzłów przyjmują wartości równe poziomowi Fermiego, $\varepsilon_0 = E_F$ ($M = 2, l = 1$). Oscylacje te widoczne są na rys. 1b dla $\varepsilon_0 = 0$ jako naprzemiennie występujące pola jasne i ciemne dla różnych długości łańcucha N (założyliśmy, że $E_F = 0$ jest energią odniesienia).



Rysunek 1. (a) Schemat układu rozpatrywanego w pracy [H2]: liniowy łańcuch N węzłów pomiędzy elektrodami L i R oraz (b) transmitancja przez łańcuch w funkcji położenia poziomów energetycznych ε_0 oraz długości łańcucha N .

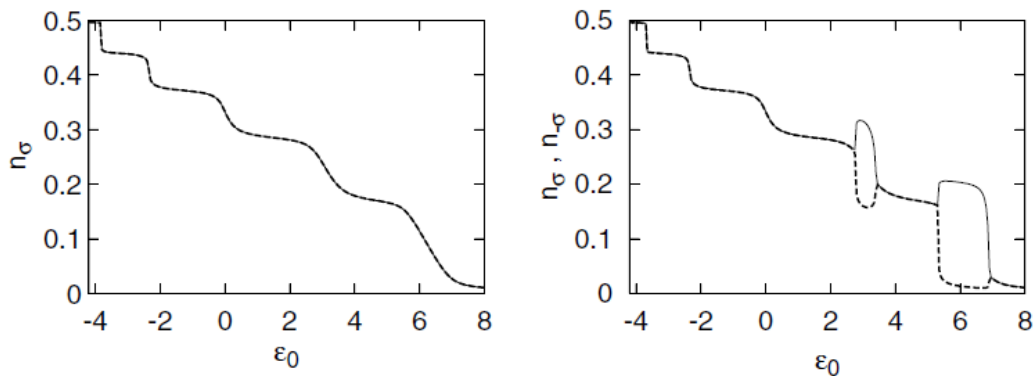
Zauważmy, że np. oscylacje z okresem $M = 3, (l = 1, 2)$, zachodzą dla warunku $\varepsilon_0 = \pm t$ ($= \pm 4$). W ten sposób możemy tworzyć układy o dowolnych okresach oscylacji przewodnictwa lub dopasować tak wartości ε_0 (np. zewnętrznym polem elektrycznym) lub całek przeskoku t (np. ‘naprężając’ drut czy zmieniając temperaturę podłoża) aby spełniony był określony warunek oscylacji przewodnictwa. W pracy podałem także analityczne formuły na transmitancję przez układ, który wykazuje oscylacje przewodnictwa z okresem większym od 2. Wyprowadziłem również ogólny wzór na transmitancję przez łańcuch atomowy o dowolnej długości i dowolnych parametrach opisujących układ, wzór 8 w pracy [H2]. Wykazałem ponadto, że oscylacje przewodnictwa w funkcji długości łańcucha związane są z obsadzeniem ładunkowym węzłów sieci (uśrednionym ładunkiem). Po raz pierwszy w literaturze pokazałem, że dla danego okresu oscylacji przewodnictwa, M , dopuszczalnych jest $M - 1$ wypełnień ładunkowych łańcucha. Zatem znajomość okresu oscylacji nie pozwala jednoznacznie określić elektronowego obsadzenia łańcucha. Z drugiej strony, informacja o średnim wypełnieniu łańcucha wskazuje jednoznacznie na okres oscylacji przewodnictwa takiego układu.

Regularne, metaliczne łańcuchy atomowe mogą być wytwarzane np. na powierzchniach anizotropowych (wicynalnych), które charakteryzują się płaskimi tarasami wzdłuż jednego z kierunków krystalograficznych. W grupie, w której pracuję, badania eksperymentalne własności elektrycznych takich układów prowadzone są od kilkunastu lat i wciąż są rozwijane. Wyniki tych badań, dotyczące łańcuchów atomowych wytwarzanych na różnych

powierzchniach, bardzo mnie zainteresowały i dlatego wziąłem czynny udział w interpretacji i teoretycznym opisie obserwowanych w eksperymentach zjawisk. Rezultatem tych badań jest **publikacja [H3]** wykonana we współpracy z prof. dr. hab. Mieczysławem Jałochowskim oraz dr. hab. Mariuszem Krawcem. Praca ta dotyczy badań topografii STM łańcuchów atomowych wytwarzanych na powierzchni krzemu Si(335) - powierzchnia ta charakteryzuje się płaskimi tarasami o szerokości ok. 1,22nm, ale nie jest uporządkowana makroskopowo. Nałożenie pewnej ilości atomów złota (ok. 0,28ML, 1ML = $7,83 \cdot 10^{14}$ atomów/cm²) i wygrzanie układu pozwala uzyskać regularną tablicę łańcuchów atomowych na dużych obszarach. Umożliwia to wytwarzanie na takich powierzchniach bardzo długich, pojedynczych łańcuchów atomowych. Badania opisane w pracy [H3] Zmierzona topografia STM powierzchni Si(335) porządkowanej atomami złota wykazała istnienie jednowymiarowych łańcuchów, dla których występuje odwrócenie topografii STM przy zmianie polaryzacji napięcia. W celu opisanego tego zjawiska, wspólnie z dr. hab. Mariuszem Krawcem, zastosowaliśmy model teoretyczny (metoda ciasnego wiązania) do opisu układu złożonego z ostrza STM zakończonego pojedynczym atomem i atomowego łańcucha umieszczonego na powierzchni. Wykonane zostały samozgodne obliczenia numeryczne dla takiego układu, a uzyskane wyniki wskazują, że odwrócenie topografii obrazu STM przy zmianie polaryzacji związane jest ze strukturą energetyczną łańcucha tj. z asymetryczną funkcją lokalnych gęstości stanów względem energii Fermiego. Interesujące, że dla rozważanego układu okres modulacji topografii STM wzdłuż łańcuchów wynosi 7,68 Å, co jest równe podwojonej stałej sieci dla atomów Si w kierunku wzdłuż tarasów $[1\bar{1}0]$. Obserwowany w eksperymencie efekt modulacji topografii łańcucha atomowego skłonił mnie do przeprowadzenia bardziej szczegółowych badań, gdyż jak sądziłem, jest on związany z występowaniem w takich układach fal gęstości ładunku. Fale ładunkowe pojawiają się w łańcuchu atomowym, jeśli spełniony jest warunek na oscylacje przewodnictwa elektrycznego, co opisałem w pracy [H5].

W układach jednowymiarowych istotną rolę mogą odgrywać oddziaływania kulombowskie pomiędzy elektronami znajdującymi się na tym samym węzle łańcucha. W jednopoziomowych kropkach kwantowych korelacje takie prowadzą do pojawienia się dwóch wierzchołków przewodnictwa elektrycznego (co związane jest z efektem blokady kulombowskiej) lub też do wystąpienia w układzie rezonansu Kondo. W układach jednowymiarowych korelacje elektronowe mogą prowadzić np. do separacji spinowo-ładunkowej, spontanicznej polaryzacji spinowej czy anomalii kwantowania przewodnictwa (tzw. anomalia 0.7G). Zaproponowałem więc badania mające na celu sprawdzenie czy, i jak korelacje elektronowe wpływają na efekt oscylacji przewodnictwa elektrycznego w drutach kwantowych. Zachodziło podejrzenie, że korelacje elektronowe mogą blokować/tłumić efekt oscylacji i wpłynąć na jego okresowość. Badania te wykonałem we współpracy z dr. hab. Mariuszem Krawcem i zostały opisane w **publikacji [H4]**. W obliczeniach wykorzystaliśmy hamiltonian typu Hubbarda dla drutu kwantowego oraz metodę bozonów pomocniczych dla silnych korelacji. Uzyskane przeze mnie wyniki numeryczne wskazywały, że w badanym układzie oprócz stanów paramagnetycznych

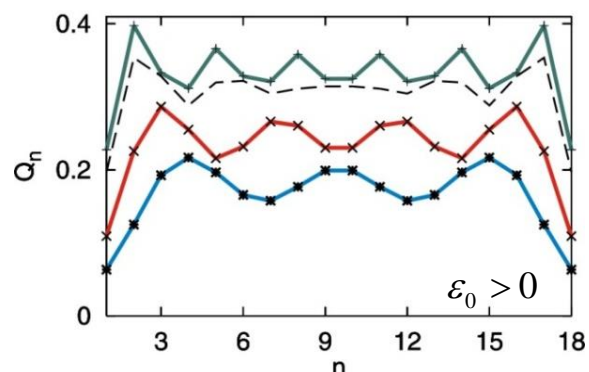
mogą występować rozwiązania ferromagnetyczne charakteryzujące się różnym obsadzeniem spinowym dla danego węzła sieci. W omawianej publikacji podany został warunek na oscylacje przewodnictwa z dowolnym okresem dla układów paramagnetycznych. W odróżnieniu od wyrażenia jakie wyprowadziłem w pracy [H2] (brak korelacji elektronowych), w tym przypadku, warunek na oscylacje przewodnictwa jest uzależniony od wartości obsadzenia węzłów. Jedną z konsekwencji tego faktu jest to, że przewodnictwo elektryczne ulega największym zmianom dla silnie obsadzonych węzłów, natomiast dla słabo obsadzonego łańcucha prawie nie zależy od korelacji na węzłach. Przewodnictwo elektryczne łańcucha bez korelacji elektronowych na węzłach jest całkowicie symetryczne w funkcji położenia poziomów energetycznych łańcucha. W omawianej pracy wykazaliśmy, że dla silnych korelacji symetria ta zostaje złamana. Ponieważ w układzie występują rozwiązania ferromagnetyczne więc obserwujemy rozszczepienie wierzchołków przewodnictwa (spontaniczna polaryzacja spinowa) i pojawienie się tzw. oczek ferromagnetycznych, widocznych na rysunku 2, prawy panel (w przypadku rozwiązań paramagnetycznych oczka te nie występują, lewy panel). Mają one istotny wpływ na przewodnictwo w drucie kwantowym, bowiem skutek rozszczepienia wierzchołków przewodnictwa dużej modyfikacji ulegają oscylacje przewodnictwa elektrycznego.



Rysunek 2. Uśrednione obsadzenia po wszystkich węzłach łańcucha ($N=5$) w funkcji położenia poziomów energetycznych, ε_0 . Rozwiązania paramagnetyczne (ferromagnetyczne) przedstawia panel lewy (prawy), [H4].

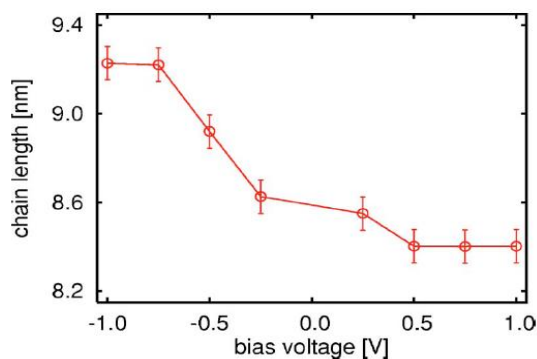
Badania oscylacji przewodnictwa w takim silnie skorelowanym układzie potwierdziły nasze wcześniejsze przypuszczenia. Dla układów para- jak również ferro-magnetycznych zaobserwowaliśmy oscylacje przewodnictwa w funkcji długości łańcucha o różnych okresach. Oscylacje te charakteryzowały się zanikającą amplitudą dla dużych N (dla rozwiązań paramagnetycznych amplituda oscylacji malała wolniej niż w przypadku rozwiązań ferromagnetycznych). Należy zauważyć, że w przypadku symetrii cząstka-dziura tzn. dla $\varepsilon_0 = 0$, w układzie istniały zawsze tylko rozwiązania paramagnetyczne i obserwowaliśmy niezanikające parzysto-nieparzyste oscylacje przewodnictwa. Badania te wykazały, że w układach silnie skorelowanych występuje zjawisko oscylacji przewodnictwa elektrycznego, a zmiana okresu tych oscylacji może nastąpić na skutek przejścia układu ze stanu paramagnetycznego w stan ferromagnetyczny.

Praca [H5] jest kontynuacją badań własności transportowych w drucie kwantowym ze szczególnym uwzględnieniem zjawiska powstawania fal ładunkowych. Jest to niezwykle ciekawy proces, w którym elektrony rozmieszczane są wzdłuż regularnego drutu kwantowego, ale nie obsadzają jednakowo wszystkich węzłów. Na skutek odbić fal elektronowych od zaburzeń w drucie lub brzegów łańcucha tworzy się wzdłuż drutu wypadkowa fala gęstości ładunku ze zróżnicowanym obsadzeniem węzłów (rezonans Febry-Perota). W publikacji [H5] opisałem proces formowania się takiej fali ładunkowej. Stosując metodę funkcji Greena obliczyłem obsadzenia węzłów łańcucha idealnego (z regularnym rozłożeniem węzłów) oraz zaburzonego przez przyłączenie z jego boku dodatkowego atomu. W omawianej pracy wykazałem, że fale ładunku wzdłuż drutu kwantowego powstają w przypadku, gdy spełniony jest taki sam warunek, jaki jest potrzebny do pojawienia się oscylacji przewodnictwa (transmitancji) w funkcji długości łańcucha. Efekt wytworzenia się fali ładunkowej wzdłuż drutu związany jest ze strukturą lokalnej gęstości stanów (LDOS) na poszczególnych węzłach. Struktura ta dla łańcuchów regularnych zawsze jest symetryczna względem poziomu Fermiego z tym, że różne węzły charakteryzują się inną intensywnością wierzchołków LDOS. Istotne jest, że poprzez zmianę parametrów układu np. położenia poziomów energetycznych na węzłach, możemy modulować okres fal ładunkowych jak pokazano na rys. 3 dla łańcucha o długości $N=18$ węzłów. Jeśli spełniony jest warunek do powstania oscylacji przewodnictwa z okresem $M=3$ to obserwujemy falę ładunkową wzdłuż drutu z takim samym okresem (linia górna). Podobnie znajdujemy fale ładunkowe z okresem oscylacji $M=4$ (linia środkowa) lub $M=6$ (linia dolna). Istnienie fal ładunkowych wzdłuż drutu jest jednak niezwykle czułe na wartości położenia poziomów energetycznych, ε_0 . Już nawet nieduże odstępstwo od wartości rezonansowej (obliczonej ze wzoru) powoduje zanik fal ładunkowych w układzie (por. krzywą przerywaną obliczoną dla $\varepsilon_0 = 1,093t$ z linią górną dla $\varepsilon_0 = t$). W pracy tej wykazałem również, że dołączenie do układu dodatkowego węzła (adatomu) zaburza rozkład fali ładunkowej tylko lokalnie tzn. największe zmiany ładunku obserwujemy dla węzłów bezpośrednio sprzężonych z zaburzeniem.



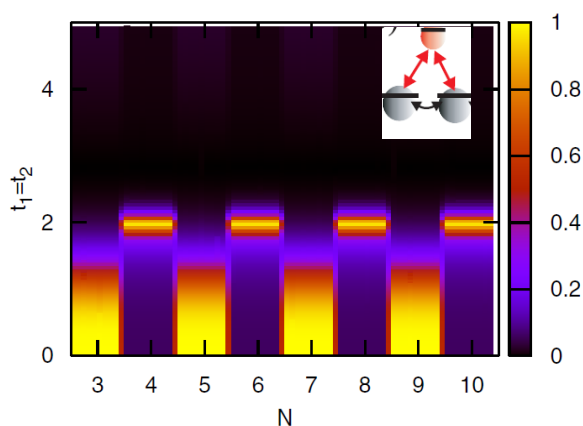
Rysunek 3. Rozkład ładunku wzdłuż drutu kwantowego złożonego z $N=18$ węzłów dla różnych wartości położenia ε_0 : $\varepsilon_0 = t, \sqrt{2}t, \sqrt{3}t$ - linia górna, środkowa i dolna. Linia przerywana wykonana dla $\varepsilon_0 = 1.093t, t = 4$, [H5].

Ważny z punktu widzenia badań eksperymentalnych, w szczególności pomiarów STM, jest wynik pokazujący, że dla przeciwnych polaryzacji łańcucha (dodatnich lub ujemnych położeń poziomów jednocząstkowych względem poziomu Fermiego) następuje 'odwrócenie' fali gęstości ładunku tzn. minima funkcji przechodzą w maksima i na odwrót. Efekt ten obserwowany był również w badaniach eksperymentalnych STM łańcuchów Au na powierzchni Si(335), [H3]. Warto podkreślić, że przy zmianie polaryzacji łańcucha obserwujemy inną liczbę wierzchołków fali gęstości ładunku np. linia dolna dla polaryzacji dodatniej posiada 3 wierzchołki (rys. 3), a dla polaryzacji ujemnej obserwujemy 4 wierzchołki z dużymi wartościami obsadzeń na końcach drutu, [H5]. Zatem oszacowanie rozmiarów badanego obiektu (np. długości drutu) na podstawie obserwacji wierzchołków fali ładunkowej w drucie silnie zależy od polaryzacji łańcucha. Wynik ten znajduje potwierdzenie w badaniach STM stanów ładunkowych, które prowadziłem wspólnie z prof. dr. hab. Mieczysławem Jałochowskim oraz dr. hab. Mariuszem Krawcem, i które zostały opisane w **publikacji [H6]**. Praca ta dotyczy badań przewodnictwa STM przez struktury jednowymiarowe na powierzchni krzemu Si(557) - jest to powierzchnia wicynalna charakteryzująca się regularnymi, płaskimi tarasami, o szerokości 1,88nm (w porównaniu z powierzchnią Si(335) tarasy są szersze o 0,66nm). Umożliwia to wytwarzanie na takiej powierzchni, w obrębie jednego tarasu, podwójnych łańcuchów atomowych. Zmierzona topografia STM powierzchni Si(557) porządkowanej atomami złota, wykazała istnienie dwóch nierównoważnych łańcuchów na pojedynczym tarasie, z których jeden wykazywał odwrócenie topografii STM przy zmianie polaryzacji STM, a drugi łańcuch nie wykazywał takich zmian. Co ciekawe, okres modulacji topografii STM wzdłuż obu łańcuchów był taki sam i wynosił dokładnie dwie stałe sieciowe wzdłuż kierunku $[1\bar{1}0]$. W celu wyjaśnienia tych ciekawych wyników eksperymentalnych, wspólnie z dr. hab. Mariuszem Krawcem, zaproponowaliśmy model układu złożony z dwóch łańcuchów atomowych sprzężonych z podłożem oraz z ostrza STM zakończonego pojedynczym atomem. W obliczeniach wykorzystany został hamiltonian ciasnego wiązania oraz formalizm funkcji Greena. Uzyskane wyniki numeryczne (obliczenia samozgodne) wskazują, że odwrócenie topografii obrazu STM przy zmianie polaryzacji następuje dla łańcuchów atomowych Si i związane jest ze strukturą energetyczną łańcucha oraz położeniem poziomów jednocząstkowych. Tak więc zmiana polaryzacji napięcia STM silnie wpływa na uzyskiwane obrazy topograficzne łańcuchów. Prowadzi to do niepewności w oszacowaniu rozmiarów badanego obiektu i np. mierzona długość łańcucha atomowego może zmieniać się nawet o 1 nm w zależności od polaryzacji STM, co obrazuje wynik eksperymentalny na rys. 4 z pracy [H6].



Rysunek 4. Zmierzona długość łańcucha atomowego wytworzonego na powierzchni Si(557) w funkcji napięcia STM, [H6].

Łańcuchy atomowe wytworzone na wycinalnych powierzchniach są narażone na liczne zaburzenia jakimi mogą być np. obce atomy (adatomy). Taki adatom może połączyć się z regularnym łańcuchem na kilka sposobów tzn. w geometrii jeden-do-jednego (oddziaływanie adatomu tylko z jednym atomem łańcucha) czy jeden-do-dwóch (adatom zostaje dołączony pomiędzy dwa węzły łańcucha). W publikacji [H7] rozpatrywałem różne geometrie połączeń adatom-łańcuch i badałem ich wpływ na przewodnictwo elektryczne wzdłuż łańcucha. W omawianej pracy wyprowadziłem analityczne formuły na transmitancję przez łańcuch liniowy z zaburzeniem (adatomem) dla obu rozważanych geometrii, a końcowe wzory wyraziły się przy pomocy wielomianów Czebyszewa II-ego rodzaju. Wykazałem, że w przypadku połączenia adatomu tylko z jednym węzłem łańcucha transmitancja przez drut kwantowy zawsze maleje (w funkcji sprzężenia adatom-łańcuch). Dla połączenia adatomu jednocześnie z dwoma węzłami sieci transmitancja może wzrosnąć, co prowadzi np. do odwrócenia efektu oscylacji przewodnictwa w funkcji długości łańcucha i zamiast oscylacji parzysto-nieparzystych zaobserwowałem (po raz pierwszy w literaturze) oscylacje nieparzysto-parzyste. Efekt ten przedstawiony jest na rys. 5, gdzie dla układu bez domieszki, $t_1 = t_2 = 0$, widoczne są oscylacje parzysto-nieparzyste w funkcji długości łańcucha, N , natomiast dla $t_1 = t_2 = 2$ obserwujemy odwrócenie oscylacji (oscylacje nieparzysto-parzyste). Efekt ten związany jest ze zjawiskiem interferencji fal elektronowych, bowiem elektrony w obecności domieszki mają dostępne dwie drogi tunelowania: bezpośrednio przez atomy łańcucha (N węzłów) lub przez atom zaburzający ($N+1$ węzłów).



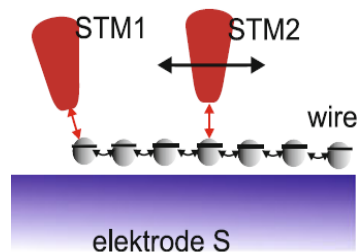
Rysunek 5. Przewodnictwo elektryczne w funkcji długości łańcucha, N , oraz wartości sprzężeń pomiędzy adatomem i atomami łańcucha, $t_1 = t_2$, w geometrii ‘jeden-do-dwóch’, [H7].

Zauważmy, że dla pewnych wartości sprzężeń adatom-łańcuch, w geometrii jeden-do-dwóch, przewodnictwo elektryczne nie wykazuje żadnych oscylacji w funkcji długości łańcucha np. dla $t_1 = t_2 = 1.8$ na rys. 5 (interferencja destrukcyjna). Należy jednak podkreślić, że przyłączenie obcego atomu do łańcucha nie zmienia okresu oscylacji przewodnictwa. Zmiana geometrii sprzężeń adatom-łańcuch prowadzi jedynie do zmiany wartości przewodnictwa układu przy zachowaniu okresu oscylacji.

Obecność adatomu (atomu domieszki, zaburzenia) połączonego z drutem kwantowym widoczna jest w przewodnictwie elektrycznym mierzonym wzdłuż drutu [H7]. Interesujący był zatem problem, czy w pomiarze przewodnictwa STM (pomiar nie wzdłuż łańcucha, ale w geometrii do niego prostopadłej: pomiędzy ostrzem STM, pojedynczym węzłem łańcucha i podłożem) można stwierdzić obecność zaburzenia, które ma miejsce w pewnej odległości od punktu pomiaru STM. Przyłączenie np. obcego atomu do regularnego łańcucha atomowego jest zjawiskiem dość częstym, zachodzącym w wielu eksperymentach przeprowadzanych w warunkach UHV. Zaproponowałem więc wykonanie takich badań i w **publikacji [H8]** wspólnie prof. dr. hab. M. Jałochowskim oraz dr. hab. M. Krawcem analizowaliśmy przewodnictwo różniczkowe w geometrii STM dla łańcucha atomowego z dołączonym z boku dodatkowym atomem. Uzyskane przeze mnie wyniki numeryczne wykazały, że obecność dodatkowego atomu jest widoczna w lokalnych i całkowitych gęstościach stanów łańcucha. Te z kolei związane są z przewodnictwem różniczkowym STM badanych obiektów. Na podstawie analizy funkcji gęstości stanów można określić, który węzeł łańcucha połączony jest z atomem zaburzającym. Ponadto, pojawiające się nowe wierzchołki w strukturze gęstości stanów odpowiadają położeniu poziomów energetycznych obcych atomów. Możliwe jest zatem określenie jakiego rodzaju atom połączył się z łańcuchem. Badania spektroskopowe STM również potwierdzają obecność zaburzenia przy łańcuchu. Szczególnie widoczne jest to w charakterystykach prądowo-napięciowych, gdzie obserwuje się dodatkowe wierzchołki na krzywych prądowych w zależności od rodzaju połączenia domieszki z łańcuchem oraz położenia poziomów energetycznych adatomu. Dla podłączenia obcego atomu jednocześnie do dwóch węzłów łańcucha przewodnictwo różniczkowe STM wykazuje charakterystyczne zachowanie typu rezonansu Fano, o ile wartości całek przeskoku pomiędzy adatomem i atomami łańcucha są porównywalne.

Stabilne i regularne łańcuchy atomowe mogące mieć zastosowanie w nanoelektronice wytwarzane są najczęściej na powierzchniach anizotropowych (schodkowych). Zatem atomy metalicznego łańcucha oddziałują bezpośrednio z atomami podłoża, przez co przewodnictwo wzdłuż łańcucha ulega modyfikacji. Jednym z zagadnień, jakim zajmowałem się podczas mojego pobytu na stypendium Humboldta w Instytucie Fizyki na Uniwersytecie Augsburskim w Niemczech było uwzględnienie wpływu podłoża na transport elektronowy wzdłuż drutów kwantowych. Przy realizacji tych badań, których byłem pomysłodawcą, skorzystałem z doświadczenia prof. dr. hab. Petera Hänggiego (kierownika grupy teoretycznej) oraz dr. hab. Sigmunda Kohlera, którzy w swoich badaniach zajmowali się m.in. oddziaływaniem

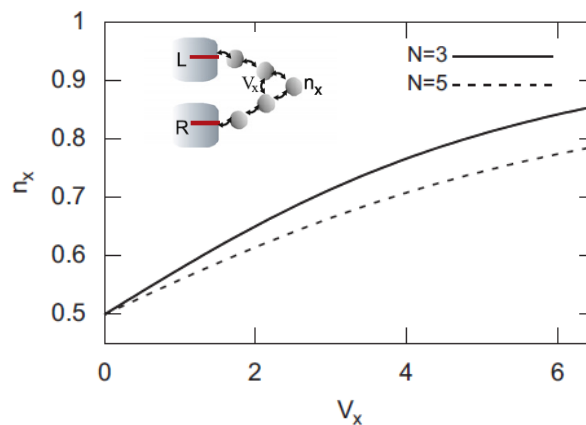
dwupoziomowych układów kwantowych (qubitów) z różnego rodzaju podłożami. Rezultatem tych badań jest **publikacja [H10]**, która dotyczy zagadnień transportu elektrycznego wzdłuż drutu kwantowego umieszczonego na powierzchni. Korzystając z metody funkcji Greena obliczyłem przewodnictwo elektryczne układu znajdującego się pomiędzy dwiema ruchomymi elektrodami, które mogą być podłączone w dowolnych miejscach łańcucha – w geometrii tej prąd płynie jedynie przez tę część drutu, która znajduje się pomiędzy elektrodami (a nie wzdłuż całego łańcucha). Jedną z możliwych realizacji takiego układu opartą jest na wieloostrowym mikroskopie tunelowym schematycznie przedstawiona na rys. 6.



Rysunek 6. Łańcuch atomowy na powierzchni z elektrodami zewnętrznymi (STM1 i STM2), [H10].

W pracy analizowaliśmy efekty lokalizacji elektronów w podłożu i ich wpływ na obsadzenia poziomów energetycznych węzłów łańcucha oraz na przewodnictwo. W szczególności badaliśmy zjawisko oscylacji przewodnictwa w funkcji długości łańcucha. Przeprowadzone przeze mnie obliczenia numeryczne wykazały, że w zależności od całkowitej długości łańcucha i miejsca podłączenia elektrod zewnętrznych, przewodnictwo wykazuje charakterystyczne oscylacje w funkcji odległości między elektrodami (analogiczne do parzysto-nieparzystych oscylacji przewodnictwa) lub jest bardzo małe i prawie nie oscyluje, np. dla oscylacji z okresem równym 3 węzły nie obserwujemy zmian przewodnictwa dla długości łańcucha $N=3,4,6,7,9,10,\dots$, niezależnie od miejsca podłączenia elektrod. Efekt ten wyjaśniony został w oparciu o strukturę lokalnych gęstości stanów na poszczególnych węzłach łańcucha, która w omawianym przypadku posiada lokalne minimum na poziomie Fermiego. Analiza oscylacji przewodnictwa w takim układzie pozwala wnioskować o wzajemnych relacjach pomiędzy położeniem poziomów energetycznych w łańcuchu i sprzężeniach pomiędzy węzłami. W pracy wykazaliśmy również, że w obecności podłoża amplituda oscylacji przewodnictwa w funkcji długości łańcucha maleje – dla podłoża ze zlokalizowanymi elektronami maleje stosunkowo powoli, natomiast w przypadku elektronów zdelokalizowanych amplituda oscylacji maleje najsilniej. Nie zmienia się natomiast okres oscylacji przewodnictwa w układzie z niezerowym oddziaływaniem łańcuch-podłoże. Podobne zachowanie zaobserwowaliśmy dla amplitudy oscylacji ładunków (fal ładunkowych) w łańcuchu. Wyniki te wskazują jednoznacznie, że zjawisko oscylacji przewodnictwa występuje nie tylko dla łańcuchów swobodnych (w geometrii MCBJ) lub na podłożu izolatorowym, ale także, z mniejszą amplitudą, dla powierzchni półprzewodnikowych czy metalicznych. Powinno być zatem uwzględnione w aplikacyjnych badaniach drutów kwantowych.

Mikroskop STM jest jednym z ważniejszych narzędzi do badania topografii i własności elektrycznych układów atomowych na powierzchni. Na jakość uzyskanych obrazów topograficznych oraz na rozdzielczość energetyczną w badaniach spektroskopowych istotny wpływ ma ostrze mikroskopu STM. W literaturze wierzchołek ostrza STM modelowany jest najczęściej jako bezstrukturalna, metaliczna elektroda (przybliżenie szerokiego pasma), elektroda z pojedynczym atomem czy półnieskończony łańcuch atomowy. W publikacji [H12], która dotyczy badania transportu elektronowego przez kilkuatomowy drut kwantowy znajdujący się na przewodzącym podłożu, zaproponowałem model ostrza STM (po raz pierwszy w literaturze) w postaci zgiętego, krótkiego łańcucha atomowego sprzężonego z rezerwuarem elektronów (wstawka na rys. 7).

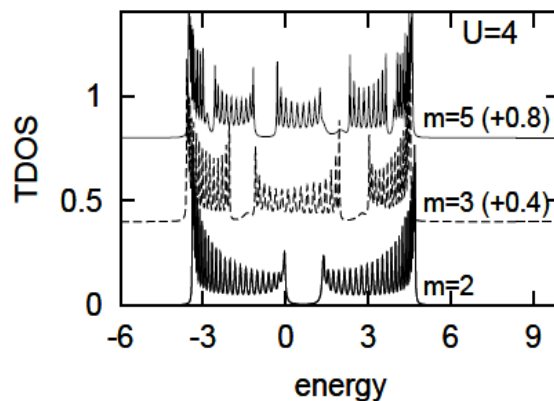


Rysunek 7. Obsadzenie atomu x stanowiącego wierzchołek ostrza STM w funkcji parametru sprzężenia V_x odpowiadającego za krzywiznę ostrza. Linia przerywana (ciągła) wykonana dla układu 5 (3) atomowego, jak na rysunku schematycznym, [H12].

W tym przypadku na końcu ostrza STM znajduje się pojedynczy atom, a na rozwartość ostrza (krzywiznę) największy wpływ ma parametr sprzężenia pomiędzy kolejnymi atomami w łańcuchu, V_x . Obliczenia teoretyczne ładunków oraz przewodnictwa różniczkowego wykonałem w ramach modelu ciasnego wiązania i metody nierównowagowych funkcji Greena. Wykazałem, że wierzchołek ostrza mikroskopu STM w postaci zgiętego drutu posiada nadmiarowy ładunek, którego wielkość zależy od kąta rozwarcia ostrza, rys. 7. Naładowane ostrze mikroskopu ma istotny wpływ na przewodnictwo różniczkowe przez badany układ atomów. Rozważyłem więc drut kwantowy umieszczony na powierzchni, który charakteryzował się symetryczną (względem energii Fermiego) gęstością stanów. Badania przewodnictwa elektrycznego takiego obiektu przy pomocy ostrza STM (modelowanego jako zgięty drut) wykazały, że przewodnictwo STM jest asymetryczną funkcją przyłożonego napięcia. Efekt ten wywołany jest istnieniem dodatkowego, obsadzonego stanu elektronowego w ostrzu STM. W przypadku ostrza bez nadmiarowego ładunku przewodnictwo różniczkowe jest symetryczne dla dodatnich i ujemnych napięć. Wyniki badań opisane w pracy [H12] zostały wykorzystane w publikacji [A10]. Eksperymentalne badania topografii powierzchni Si(111)-6x6/Au z wyspami Ag przeprowadzone przez prof. dr. hab. Mieczysława Jałochowskiego wykazały zmianę jakości ostrza STM podczas skanowania, co prowadziło do pogorszenia rozdzielczości otrzymywanych obrazów. Wykonane

badania spektroskopowe ujawniły dodatkowy wierzchołek na krzywej przewodnictwa różniczkowego dla ‘ostrego’ ostrza STM, a obliczenia jakie wykonałem metodą funkcji Greena w pełni potwierdziły wyniki eksperymentalne tj. istnienie stanu elektronowego na ostrzu poniżej energii Fermiego. (Publikacja [A10] nie została włączona do cyklu głównych prac w postępowaniu habilitacyjnym, ponieważ nie dotyczy bezpośrednio zagadnień związanych z własnościami elektrycznymi drutów kwantowych, choć pośrednio potwierdza wyniki badań uzyskane w pracy [H12]).

Ciekawe wyniki badań uzyskane dla łańcucha umieszczonego na różnego rodzaju podłożach [H10] oraz dla łańcucha zaburzonego adatomem [H7] skłoniły mnie do rozbudowania dotychczasowych modeli i rozważenia drutu kwantowego z większą ilością domieszek (rozieszczonych regularnie lub chaotycznie wzdłuż drutu). W układach jednowymiarowych na powierzchni takie zaburzenia występują zawsze, a ich regularny rozkład wynika z rozmieszczenia atomów na krawędziach tarasów i może prowadzić do pojawienia się przerw energetycznych w układzie. Odpowiedzialne są one za skokowe zmiany przewodnictwa elektrycznego interpretowanego jako przejście fazowe. Przejścia fazowe w układach jednowymiarowych mogą zostać wywołane zmianami geometrycznymi układu (zmianą położenia atomów w komórce sieci) lub zmianami niegeometrycznymi, związanymi z gęstością stanów układu. W **publikacji [H16]** zbadałem wpływ regularnie rozmieszczonych domieszek w łańcuchu atomowym na strukturę całkowitej gęstości stanów układu oraz rolę podłoża, na którym wytworzony zastał łańcuch. Domieszki stanowiły atomy magnetyczne, na których uwzględniono oddziaływanie kulombowskie, U , metodą średniego pola (zaburzeniem mogły też być atomy podłoża lub adatomy).



Rysunek 8. Całkowita gęstość stanów (TDOS) łańcucha atomowego złożonego z $N=50$ atomów z domieszkami rozłożonymi co m -ty węzeł sieci – widoczne są przerwy energetyczne w TDOS, [H16].

Dla regularnego łańcucha bez domieszek, złożonego tylko z atomów niemagnetycznych ($U=0$), nie obserwuje się przerw energetycznych w strukturze gęstości stanów. W przypadku, gdy domieszki zajmują co m -ty węzeł sieci całkowita gęstość stanów posiada w swej strukturze przerwy energetyczne, rysunek 8. Jeśli np. co drugi węzeł łańcucha jest zaburzony, $m=2$, to obserwujemy tylko jedną przerwę energetyczną pośrodku pasma. Fakt ten można wytłumaczyć analizując zmianę lokalnej gęstości stanów w komórce elementarnej układu dla $U=0$ i

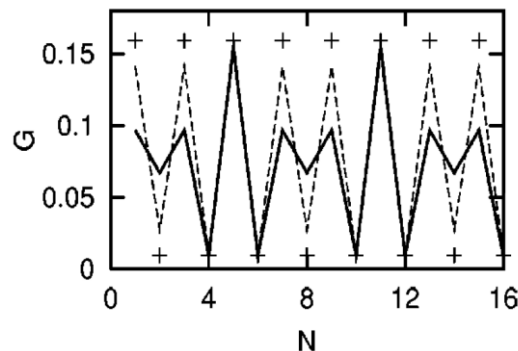
niezerowych wartości U . W ogólności, dla periodyczności domieszek równej m występuje $m-1$ obszarów wzbronionych w strukturze DOS. Efekt ten odpowiedzialny jest za blokadę przewodnictwa układu dla elektronów o energii znajdującej się w obszarze przerwy energetycznych. Warto zaznaczyć, że dla przypadkowego rozkładu domieszek w łańcuchu, przerwy energetyczne nie występują (podobnie jak w izolatorze Andersona). Ponadto, w pracy [H16] wykazałem, że dla łańcucha atomowego znajdującego się na podłożu z silnie zlokalizowanymi elektronami wierzchołki DOS rozmywają się. W tym przypadku przerwy energetyczne w strukturze DOS zanikają dla dużych wartości sprzężeń łańcucha z podłożem i przewodnictwo elektryczne szybko wzrasta (przejście izolator-metal). Odmienną sytuację zaobserwowałem dla podłoża ze zdelokalizowanymi elektronami - w tym przypadku przerwy energetyczne w strukturze DOS nie zamykały się (po włączeniu sprzężenia łańcuch-podłoże) i nie obserwowałem rozmycia wierzchołków DOS. Ma to swoje odzwierciedlenie w przewodnictwie przez łańcuch, które dla podłoża ze zdelokalizowanymi elektronami słabo zależy od sprzężenia łańcucha z podłożem (elektron, który przetunelował z łańcucha do podłoża może pojawić się z takim samym prawdopodobieństwem na każdym innym węźle łańcucha i bierze dalej udział w przewodnictwie).

Część B: Procesy zależne od czasu

Badania oscylacji przewodnictwa w drutach kwantowych wykazały, że okres tych oscylacji związany jest ze strukturą gęstości stanów łańcucha, a konkretnie z rozmieszczeniem wierzchołków DOS, [H2, H5]. Mając na uwadze doświadczenie zdobyte podczas badań transportu elektronowego przez kropkę kwantową umieszczoną w polach mikrofalowych (zaburzenie zależne od czasu), postanowiłem zastosować zmienne w czasie zaburzenia do łańcucha atomowego. W zewnętrznym polu elektromagnetycznym pojedynczy stan energetyczny atomu (lub kropki kwantowej) ulega modyfikacji: na krzywych przewodnictwa elektrycznego oraz w gęstościach stanów układu pojawiają się tzw. stany boczne o energiach będących całkowitymi wielokrotnościami energii kwantu pola zewnętrznego (sidebands). Przewidywałem, że takie zewnętrzne zaburzenie zmodyfikuje również strukturę DOS łańcucha (pojawiają się nowe wierzchołki) co będzie miało istotny wpływ na przewodnictwo układu, w szczególności na okres oscylacji przewodnictwa.

W **publikacji [H1]** badałem, po raz pierwszy w literaturze, zjawisko oscylacji przewodnictwa i własności elektryczne drutu kwantowego umieszczonego pomiędzy elektrodami i poddanego działaniu zewnętrznego pola elektromagnetycznego. Zastosowałem metodę operatora ewolucji oraz hamiltonian ciasnego wiązania. Obliczony prąd płynący przez łańcuch można było zapisać przy pomocy formuły Landauera, a przy pewnych szczególnych założeniach

wykonać obliczenia analityczne (por. [H14]). Zgodnie z przewidywaniami, w obecności zmiennego w czasie zaburzenia wierzchołki transmitancji rozszczepiają się, co prowadzi do pojawienia się wielu mniejszych wierzchołków oddalonych od wierzchołka centralnego o wartość energii kwantu promieniowania zewnętrznego. Zachowanie takie obserwowałem dla energii kwantów pola zewnętrznego większej od wartości sprzężenia łańcucha z elektrodami. W przeciwnym przypadku wierzchołki transmitancji ulegają jedynie poszerzeniu i rozmyciu. Struktura i położenie wierzchołków związanych z zewnętrznym polem zaburzającym ma kluczowe znaczenie dla oscylacji przewodnictwa w funkcji długości łańcucha. O ile w przypadku stacjonarnym obserwujemy oscylacje np. z okresem dwóch atomów (parzysto-nieparzyste oscylacje przewodnictwa, krzyżyki na rys. 9), to dla zadanych parametrów częstości oscylacji pola zewnętrznego okres ten zwiększa się i wynosi np. 6 atomów, linia ciągła na rys. 9.



Rysunek 9. Przewodnictwo w funkcji długości łańcucha N w przypadku stacjonarnym (krzyżyki) oraz w obecności zależnego od czasu pola zewnętrznego o amplitudzie $\Delta = 2$ (4) - linia przerywana (ciągła), [H1].

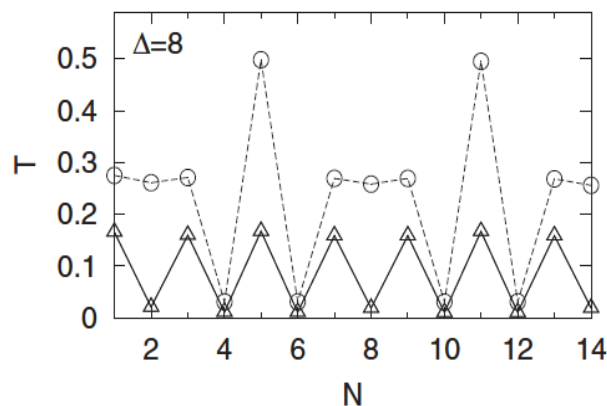
Wy tłumaczenie tego zjawiska dokonane zostało w oparciu o strukturę wierzchołków transmitancji w funkcji energii (odpowiadającym położeniu poziomów molekularnych i wierzchołków całkowitej DOS). Tak więc zmiana okresu oscylacji przewodnictwa wzdłuż łańcucha jest możliwa w obecności zewnętrznego pola elektromagnetycznego – jest to główny wniosek pracy [H1]. Warto podkreślić, że jest to pierwsza praca w literaturze, w której zaobserwowano oscylacje przewodnictwa elektrycznego z okresem większym niż dwa węzły, w układzie poddanym działaniu zależnego od czasu pola zewnętrznego. Prąd płynący w takim układzie również silnie zależy od parametrów zależnego od czasu zaburzenia oraz napięcia między elektrodami. Uśredniony w czasie prąd w funkcji energii stanów elektronowych w łańcuchu, wykazuje podobną strukturę do funkcji transmitancji (z charakterystycznymi wierzchołkami typu ‘sidebands’) z tym, że wierzchołki prądu są poszerzone o wartość napięcia źródło-dren.

Badania przewodnictwa w układach jednowymiarowych poddanych działaniu harmonicznego pola zewnętrznego doprowadziły np. do zaobserwowania zmiany okresu oscylacji przewodnictwa elektrycznego w funkcji długości łańcucha [H1]. Można przypuszczać, że zastosowanie dwóch lub więcej harmonicznnych pól zewnętrznych prowadzi do pewnych modyfikacji przewodnictwa, które dadzą się opisać działaniem jednego, efektywnego (wypadkowego) pola zewnętrznego działającego na układ. Niestety nie jest to prawdą. Okazuje

się bowiem, że dodanie tzw. drugiej harmonicznej prowadzi do złamania symetrii czasowej (time-reversal symmetry), co objawia się asymetryczną gęstością stanów układu i w konsekwencji może wywołać przepływ ładunku przez układ bez przykładania napięcia zewnętrznego. Interesujące było zatem sprawdzenie, jak zachowa się drut kwantowy poddany działaniu kilku pól harmonicznych. Pomysł ten zrealizowałem we współpracy z prof. dr. hab. Peterem Hänggim oraz dr. hab. Sigmundem Kohlerem przebywając na stypendium Humboltda na Uniwersytecie Augsburgskim w Niemczech, a wyniki badań zostały opisane w **publikacji [H9]**. Wykorzystując metodę zależnych od czasu funkcji Greena oraz teorię Floqueta wyprowadzone zostały analityczne formuły na zależną od czasu (jak i uśrednioną w czasie) transmitancję przez drut kwantowy poddany jednocześnie działaniu kilku pól zewnętrznych. Okazało się, że już w obecności dwóch pól harmonicznych transmitancja jest nieciągłą funkcją częstości pola i silnie zależy od współmierności pól (relacji pomiędzy częstościami pól zewnętrznych). Wynik ten ma kluczowe znaczenie dla prądów płynących przez drut kwantowy, gdyż poprzez infinitesimalną zmianę częstości jednego z pól zewnętrznych można sterować przepływem prądu przez układ. Wymierność częstotliwości pól zewnętrznych ma także duże znaczenie w zjawiskach oscylacji przewodnictwa. W pracy wyprowadziłem warunek na oscylacje przewodnictwa z okresem M węzłów w obecności dwóch pól zewnętrznych:

$$\cos(\pi l / M) = \frac{E_F - \varepsilon_0 \pm k_1 \omega_1 \pm k_2 \omega_2}{2t},$$

gdzie ω_1 , ω_2 są częstościami pól harmonicznych a k_1 , k_2 dowolnymi liczbami całkowitymi, (por. wzór (1) dla układów bez zaburzeń czasowych). Przykładowy wynik oscylacji transmitancji w funkcji długości łańcucha przedstawiony jest na rys. 10. Linia ciągła odpowiada układowi poddanemu działaniu dwóch pól zewnętrznych o tych samych częstościach (pola współmierne), natomiast linia przerywana dla częstości pól różniących się zaledwie o 1% wartości (pola niewspółmierne). Tak mała zmiana częstości jednego z zaburzeń spowodowała duże zmiany wartości transmitancji i okresu oscylacji z $M = 2$ na $M = 6$.



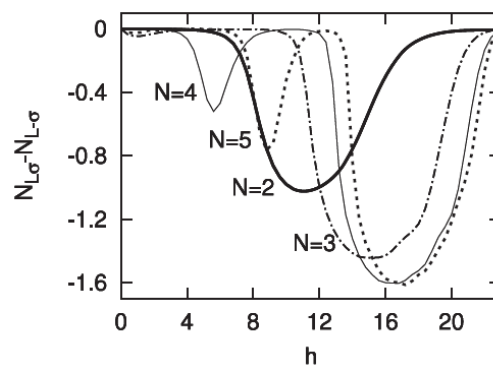
Rysunek 10. Transmitancja w funkcji długości łańcucha N w obecności dwóch zależnych od czasu pól zewnętrznych o amplitudzie $\Delta = 8$ i częstościach $\omega_1 = \omega_2 = 4$ - krzywa ciągła oraz $\omega_1 = 0.99\omega_2$ - krzywa przerywana, [H9].

Tak więc zmiana okresu oscylacji przewodnictwa w funkcji długości łańcucha może nastąpić nie tylko poprzez zmianę amplitudy oscylacji pola zewnętrznego, ale także poprzez zmianę stosunku częstotliwości pól (np. ze współmiernej na niewspółmierną) jak pokazano na rys. 10.

Dotychczas omówione zostały wyniki badań dla drutów kwantowych poddanych działaniu harmonicznym pól zewnętrznych powodujących modulacje poziomów energetycznych na węzłach. W wielu eksperymentach wykonywanych na układach jednowymiarowych istnieje również możliwość modyfikacji sprzężeń pomiędzy węzłami łańcucha. Kontrolowane zmiany w czasie wartości całek przeskoku można zrealizować np. w układach typu MCBJ (kontrolowane przerywanie złącza), gdzie harmoniczne drgania jednej z elektrod prowadzą do zmian sprzężeń między węzłami lub do zmiany konfiguracji układu z liniowego w układ typu zig-zag. Postanowiłem zająć się tym tematem bardziej szczegółowo i w **publikacji [H11]** rozważyłem drut kwantowy w konfiguracji liniowej oraz typu zig-zag z uwzględnieniem zależnych od czasu sprzężeń pomiędzy węzłami łańcucha. Używając metody operatora ewolucji obliczyłem uśrednioną transmitancję i rozkład ładunku w drucie kwantowym. Wyprowadziłem wyrażenia na odpowiednie elementy macierzowe operatora ewolucji, niezbędne do obliczenia transmitancji przez układ. Pokazałem, że dla łańcuchów liniowych o nieparzystej liczbie węzłów, transmitancja w funkcji częstości pola (zaburzającego sprzężenia pomiędzy węzłami) posiada wiele lokalnych minimów, podczas gdy łańcuchy o parzystej liczbie węzłów charakteryzują się licznymi wierzchołkami w transmitancji. Efekt ten związany jest ściśle z parzysto-nieparzystymi oscylacjami przewodnictwa w układach liniowych. Ważnym wynikiem pracy [H11] jest możliwość zmiany okresu oscylacji przewodnictwa poprzez zmianę częstości drgań dla sprzężeń pomiędzy węzłami. Efekt ten występuje zarówno dla łańcucha prostoliniowego jak również dla konfiguracji typu zig-zag. Został on wyjaśniony w oparciu o analizę poszczególnych składowych harmonicznym pola zewnętrznego (występujących w teorii Floqueta). Zmiana okresu oscylacji przewodnictwa prowadzi także do zaobserwowania w takich układach fal ładunku o różnym okresie – istnieje więc możliwość zmiany obsadzeń węzłów poprzez dopasowanie odpowiedniej częstości pola wymuszającego. W konfiguracji typu zig-zag transmitancja w funkcji wartości sprzężenia pomiędzy węzłami charakteryzuje się lokalnymi wierzchołkami z widocznym rezonansem typu Fano. Rezonans ten jest konsekwencją interferencji elektronów na dwóch drogach tunelowania w łańcuchu typu zig-zag tj. pomiędzy najbliższymi sąsiadami oraz bezpośrednio pomiędzy dalszymi węzłami.

Tunelowanie elektronu przez drut kwantowy powoduje przemieszczanie się wzdłuż drutu nie tylko ładunku elektrycznego ale także spinu. Okazuje się, że w pewnych układach przepływy spinu i ładunku mogą odbywać się niezależnie od siebie. Uznałem więc za bardzo interesujące wykonanie badań transportu elektronowego przez monoatomowy drut kwantowy, w którym zachodzą procesy pompowania ładunku i spinu oraz istotną rolę odgrywają zjawiska odwracania spinu elektronu. Proces taki (spin-flip process) może wystąpić np. na skutek oddziaływania spinu elektronu z atomami domieszek, ze spinami jąder atomowych czy oddziaływania spin-orbita. W efekcie spiny elektronów mogą przemieszczać się wzdłuż drutu pomimo zerowego prądu

ładunkowego, co prowadzi do powstania pompy spinowej lub spinowo-ładunkowej. Badania te zrealizowałem we współpracy z prof. dr. hab. Ryszardem Taranko i zostały opublikowane w **pracy [H13]**. W publikacji tej obliczenia wykonane zostały w ramach modelu ciasnego wiązania i metody operatora ewolucji dla łańcucha atomowego, w którym przemieszczał się impuls elektryczny zmieniający siłę sprzężeń pomiędzy atomami (tzw. train-impuls). Dodatkowo, łańcuch poddany był działaniu słabego pola magnetycznego, które prowadziło do rozszczepienia Zeemanowskiego poziomów energetycznych. Nasze badania wykazały istnienie pompy ładunkowej dla łańcucha atomowego w warunkach złamania symetrii przestrzennej układu, przy braku napięcia źródło-dren. W pracy pokazaliśmy, że wraz ze wzrostem długości łańcucha, N , wypadkowy ładunek przepływający przez układ nie jest zawsze monotoniczną funkcją N (nie rośnie liniowo z N jak podają badania literaturowe), ale wykazuje charakterystyczne oscylacje, podobne do parzysto-nieparzystych oscylacji przewodnictwa elektrycznego. W obecności pola magnetycznego (dla ustalonego parametru rozszczepienia Zeemanowskiego, h) przez łańcuch atomowy poddany działaniu zmiennego w czasie impulsu może przepływać tylko prąd spinowy, podczas gdy prąd ładunkowy nie płynie. Wykazaliśmy, że prąd spinowy w funkcji parametru pola magnetycznego, h , płynie przez układ tylko dla pewnych wartości parametru h i posiada charakterystyczne wierzchołki (których ilość zależy od parzystości N), rys. 11. Ponadto, wartość przepływającego prądu spinowego rośnie z długością łańcucha.



Rysunek 11. Prąd spinowy płynący przez łańcuch złożony z $N=2$ do $N=5$ węzłów w funkcji parametru pola magnetycznego h (rozszczepienie Zeemanowskie) przy zerowym napięciu źródło-dren, [H13].

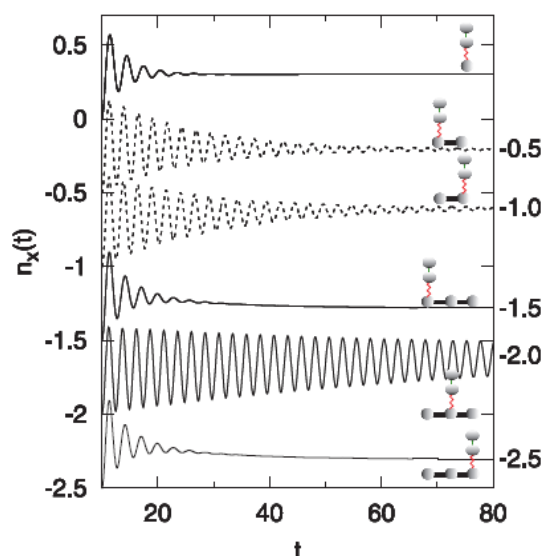
Uwzględnienie w wyjściowym hamiltonianie oddziaływania prowadzącego do odwracania spinu (spin-flip) znacząco wpływa na prądy ładunkowe i spinowe w drucie kwantowym: w pewnym zakresie parametrów zmienia się kierunek płynącego prądu, co prowadzi do separacji prądu spinowego oraz ładunkowego (kierunki przepływu obu prądów są przeciwne). Jest to dość istotny wynik pokazujący możliwości wykorzystania drutu kwantowego jako separatora spinów czy pompy ładunkowo-spinowej. W omawianej pracy wykazaliśmy także, że oddziaływanie 'spin-flip' na węzłach łańcucha nie zmienia kierunku przepływu prądu spinowego, ale może zmienić kierunek prądu ładunkowego. W tym przypadku zaburzenie (train impuls) przemieszcza się np. od elektrody lewej do prawej, a prąd elektryczny płynie w kierunku przeciwnym, od elektrody prawej do lewej. Sprawdziliśmy również czy prąd ładunkowy i prąd spinowy płynące

przez łańcuch z oddziaływaniem spin-flip wykazują oscylacje w funkcji długości łańcucha (podobnie jak dla układu bez oddziaływania spin-flip). Znane wyniki literaturowe wskazywały na monotoniczną zmianę (wzrost) przepompowywanego ładunku w funkcji N . Okazało się jednak, że w obecności oddziaływania z przewracaniem spinów zarówno wartości prądu ładunkowego jak i prądu spinowego oscylują ze zmianą długości łańcucha, o ile tylko spełniony jest warunek na oscylacje przewodnictwa, diskutowany w pracy [H2], wzór 1 w autoreferacie. W przeciwnym razie przepływające przez układ prądy charakteryzuje monotoniczna zmiana w funkcji N . Należy zaznaczyć, że oddziaływanie odwracające spiny na węzłach prowadzi w ogólności do zwiększenia pompowanego przez układ ładunku.

Przewodnictwo elektryczne drutów kwantowych wytworzonych na różnych powierzchniach wycinalnych wykazuje skokowe zmiany wartości w funkcji temperatury (przejścia fazowe). Efekt ten związany jest z drganiami sieci krystalicznej, które powodują zmianę w czasie wartości elektronowych poziomów energetycznych atomów. W **publikacji [H14]** analizowałem rolę drgań atomów (wywołanych drganiami sieci czy też zaburzeniem zewnętrznym) na transport elektronowy przez monoatomowy łańcuch umieszczony na różnych powierzchniach. W badaniach uwzględniłem amplitudę oscylacji poziomów energetycznych (związanej z temperaturą układu), częstość oscylacji oraz rolę przesunięć fazowych drgań sąsiednich węzłów sieci. Używając zależnej od czasu metody operatora ewolucji wyprowadziłem analityczne wyrażenia na prąd płynący w układzie, który był poddany działaniu harmonicznego i jednorodnego zaburzenia (pola elektromagnetycznego) wymuszającego oscylacje poziomów łańcucha. Zauważyłem, że symetria lokalnej gęstości stanów względem energii Fermiego ma decydujący wpływ na przepływ elektronów przez łańcuch przy zerowym napięciu źródło-dren. Złamanie tej symetrii może generować niezerowy prąd w układzie. Nie jest to jednak warunek wystarczający na pompowanie ładunku wzdłuż drutu. Konieczna jest zmiana fazy drgań poziomów elektronowych sąsiednich węzłów – tylko w takim przypadku w układzie może płynąć niezerowy prąd bez przykładania napięcia do elektrod. Wartość tego prądu zależy od długości łańcucha i nie jest monotoniczną funkcją N , ale wykazuje oscylacje związane z oscylacjami przewodnictwa elektrycznego. W obecności podłoża, dla niezerowego sprzężenia łańcuch-powierzchnia, wartość prądu wypływającego z elektrody źródła wzrasta ze względu na pojawienie się dodatkowego kanału przepływu elektronów do powierzchni poprzez atomy łańcucha. W badaniach uwzględniłem także przypadkowy rozkład faz, z jakimi drgają poziomy energetyczne w atomach łańcucha i obliczyłem prąd (uśredniony po wszystkich możliwych fazach) w funkcji amplitudy oscylacji poziomów energetycznych Δ . Otrzymałem więc charakterystyki odpowiadające temperaturowej zależności przewodnictwa elektrycznego dla łańcuchów o różnej długości, N . Dla układów złożonych z parzystej liczby atomów wyróżniłem dwa odrębne obszary w przewodnictwie elektrycznym. W pierwszym obszarze prąd płynący w układzie jest prawie stały, natomiast dla pewnej wartości parametru Δ obserwujemy nagły spadek wartości prądu (związany ze zmianą gęstości stanów układu na poziomie Fermiego). Należy zauważyć, że położenie punktu rozgraniczającego te dwa obszary silnie zależy od

długości łańcucha (podobnie jak temperatura przejścia fazowego w łańcuchach na powierzchniach wycinalnych zależy od jakości powierzchni, a więc także od długości łańcuchów). Wykazałem ponadto, że dla łańcuchów o nieparzystej liczbie atomów prąd wzdłuż łańcucha jest monotoniczną funkcją temperatury. Warto zaznaczyć, że makroskopowe pomiary przewodnictwa drutów na powierzchniach wycinalnych są uśrednieniem z dużego obszaru powierzchni, na której znajdują się zarówno łańcuchy o parzystej jak i nieparzystej liczbie węzłów. Taki pomiar silnie zależy od jakości przygotowanego podłoża (powierzchni), które ma decydujący wpływ na duże rozbieżności w podawanych temperaturach przejść fazowych obserwowanych w różnych eksperymentach.

We wcześniejszych pracach wykazałem, że prąd ładunkowy płynący przez łańcuch atomowy (czy drut kwantowy złożony z kropek kwantowych) jest niezwykle czuły na zaburzenia oddziałujące na węzły drutu. Zaburzeniem takim może być dwupoziomowy układ kwantowy (qubit) złożony np. z dwóch sprzężonych kropek kwantowych. Pomiar stanu ładunkowego qubitu i jego czas dekoherencji są kluczowe dla potencjalnych zastosowań takich układów w komputerach kwantowych. Z tego względu duży nacisk kładzie się na poszukiwanie takich układów, w których czasy dekoherencji qubitu są bardzo długie i aby pomiar stanu ładunkowego nie zaburzał istotnie dynamiki qubitu. Zaproponowałem więc badania stanu ładunkowego qubitu, który oddziałuje elektrostatycznie z krótkim drutem kwantowym, z uwzględnieniem różnych połączeń qubitu do węzłów drutu. Badania te prowadziłem wspólnie z prof. dr. hab. Ryszardem Taranko, a główne wyniki tych badań zostały przedstawione w **publikacji [H15]**. W omawianym układzie prąd płynący przez drut kwantowy reaguje na obsadzenia stanów w qubicie i pełni funkcję detektora ładunku (wprowadza zatem dodatkową dekoherencję). Warto podkreślić nowatorski pomysł wykorzystania jednowymiarowego łańcucha do badania dynamiki qubitu - w literaturze jako detektory ładunkowe rozpatrywane są m.in. punktowe kontakty kwantowe (quantum point contact) oraz pojedyncze lub podwójne kropki kwantowe. W pracy wykorzystaliśmy zależny od czasu model ciasnego wiązania z oddziaływaniem kulombowskim pomiędzy elektronem qubitu i elektronami w łańcuchu. Obliczyliśmy prądy płynące w układzie oraz obsadzenia węzłów przy użyciu metody równań ruchu dla funkcji korelacyjnych (wyjście poza przybliżenie średniego pola) oraz metody operatora ewolucji (w przybliżeniu Hartree'go-Focka, gdzie wyprowadzone zostały analityczne formuły na prąd i ładunek). Jeden z ważniejszych wyników pracy [H15] zaprezentowany jest na rys. 12. Przedstawia on jak zmienia się obsadzenie ładunku na qubicie w funkcji czasu po podłączeniu go do łańcucha. Prąd płynący przez detektor ładunku (łańcuch pomiędzy elektrodami) jest silnie skorelowany z oscylacjami ładunku na qubicie i również oscyluje z tą samą częstotliwością. Rozpatrywaliśmy różne konfiguracje/geometrie połączeń qubit-detektor, co obrazują rysunki pomocnicze dla $N=1$ (górna linia), $N=2$ (krzywe 2 i 3 przerywane) oraz $N=3$ (trzy dolne krzywe). Okazuje się, że połączenie qubitu z detektorem złożonym z jednego lub z dwóch węzłów prowadzi do szybkiej dekoherencji i zaniku oscylacji ładunku w qubicie oraz prądu detektora (trzy górne linie na rys. 12). Tak więc w tych przypadkach dość szybko tracona jest informacja o położeniu elektronu w qubicie.



Rysunek 12. Oscylacje ładunku na qubicie połączonym z łańcuchem o długości $N=1$ (górna krzywa), $N=2$ (2 i 3 krzywa), $N=3$ (trzy dolne krzywe) w funkcji czasu dla połączeń przedstawionych schematycznie na rysunkach pomocniczych, [H15].

W omawianej pracy wykazaliśmy, że w przypadku detektora złożonego z trzech (i więcej) węzłów dekoherencja układu silnie zależy od miejsca połączenia qubitu z łańcuchem. Jeśli rozpatrzmy detektor złożony z $N=3$ węzłów, to podłączenie qubitu do pierwszego lub trzeciego węzła prowadzi do szybkiego zaniku oscylacji prądu detektora i ładunku na qubicie (rys. 12, linie dolna i trzecia od dołu). Natomiast w przypadku podłączenia qubitu do środkowego węzła obserwujemy bardzo słabą dekoherencję i pomiar stanu qubitowego może być dokonywany przez stosunkowo długi czas (krzywa ciągła, druga od dołu na rys. 12) – w tym przypadku prąd płynący przez łańcuch również wykazuje słabo-gasnące w czasie oscylacje. Zjawisko to wyjaśniliśmy w oparciu o analizę lokalnej i całkowitej gęstości stanów w drucie kwantowym. Wykazaliśmy, że słaba dekoherencja w układzie zachodzi dla łańcuchów o dużym współczynniku transmitancji (elektrony mogą dość swobodnie przepływać przez łańcuch) oraz dla qubitu podłączonego do takiego węzła łańcucha, który charakteryzuje się małą wartością lokalnej gęstości stanów na poziomie Fermiego (w przypadku dużej wartości DOS oscylacje są silnie tłumione). Jest to bardzo ważne spostrzeżenie, gdyż dotychczas znane badania literaturowe wskazywały, że czas dekoherencji układu zależy głównie od obsadzenia węzła detektora (im słabiej obsadzony tym wolniejsza dekoherencja). Badania opisane w pracy [H15] wykazały, że to nie obsadzenie węzłów detektora odgrywa tu istotną rolę, tylko lokalna gęstość stanów na poziomie Fermiego.

Podsumowanie

Właściwości elektryczne układów niskowymiarowych różnią się istotnie od właściwości układów objętościowych. W autoreferacie, na podstawie prac [H1-H16], omówione zostały najważniejsze wyniki moich badań dotyczących transportu elektronowego w drutach kwantowych. Oprócz drutów swobodnych (nieoddziałujących z otoczeniem) rozpatrywałem też struktury jednowymiarowe wytworzone na różnego rodzaju powierzchniach oraz łańcuchy kwantowe zaburzone domieszkami rozłożonymi regularnie lub przypadkowo wzdłuż łańcucha. Szczególnie interesujące były badania zjawisk transportu elektronowego przez łańcuchy atomowe w obecności zmiennych w czasie zewnętrznych zaburzeń, które wprowadzają czasową zależność całek przeskoku czy poziomów energetycznych badanego układu. Poniżej wymieniam najważniejsze wyniki przedstawionych w referacie badań.

- a) Wykazanie istnienia oscylacji przewodnictwa elektrycznego w łańcuchach atomowych z dowolnym okresem oscylacji (większym niż dwa węzły sieci) oraz wyprowadzenie warunku jaki muszą spełniać parametry układu, aby takie oscylacje zaobserwować dla łańcuchów swobodnych oraz wytworzonych na różnych powierzchniach.
- b) Wykazanie możliwości zmiany (w sposób kontrolowany) okresu oscylacji przewodnictwa elektrycznego w łańcuchach atomowych. Zmiana okresu oscylacji może nastąpić na skutek przejścia układu ze stanu paramagnetycznego w stan ferromagnetyczny (w układach silnie skorelowanych), w polu magnetycznym powodującym rozszczepienie Zeemanowskie poziomów energetycznych na węzłach, dla łańcuchów typu zig-zag, w przypadku, gdy łańcuch poddany jest działaniu zależnego od czasu pola zewnętrznego, w obecności co najmniej dwóch pól harmonicznym o różnych częstościach oscylacji (w wyniku zmiany wymierności częstości tych pól), a także w przypadku zmiennych w czasie wartości sprzężeń pomiędzy węzłami łańcucha.
- c) Wyjaśnienie mechanizmu powstawania fal ładunkowych w łańcuchach atomowych i omówienie sposobów ich modyfikacji np. poprzez zmianę napięcia bramki wierzchołki fali ładunkowej wzdłuż drutu zmieniają swoje położenie (zmienia się również ilość wierzchołków) co ma swoje odzwierciedlenie w badaniach topografii STM łańcuchów atomowych i niepewności szacowania ich rozmiarów liniowych. Obsadzenia węzłów łańcucha jak również okres fali ładunkowej mogą być także zmieniane w obecności zależnych od czasu pól zewnętrznych działających na łańcuch.
- d) Wykazanie destrukcyjnej roli pojedynczej domieszki (zaburzenia zewnętrznego) przyłączonej 'z boku' łańcucha na przewodnictwo elektryczne. W przypadku podłączenia domieszki jednocześnie do dwóch węzłów łańcucha zaobserwowałem odwrócenie okresu

oscylacji przewodnictwa w funkcji długości łańcucha i pojawienie się w układzie oscylacji nieparzysto-parzystych. Dla łańcuchów z regularnie rozłożonymi zaburzeniami, w strukturze gęstości stanów występują przerwy energetyczne. Szerokość tych przerw silnie zależy od rodzaju podłoża, na którym jest wytworzony łańcuch i np. dla podłoży ze zdelokalizowanymi elektronami przerwy energetyczne zanikają (przejście izolator-metal).

- e) Skonstruowanie efektywnej pompy ładunkowo-spinowej wykorzystującej drut kwantowy z przyłożonym zewnętrznym, zmiennym w czasie zaburzeniem (tzw. train impuls) oraz wykazanie, że ilość ładunku przepływającego przez taki drut w jednym cyklu czasowym nie rośnie liniowo wraz z długością łańcucha, ale wykazuje charakterystyczne oscylacje (związane z oscylacjami przewodnictwa elektrycznego w takich układach). Ponadto, jednoczesny przepływ ładunku i spinu przez taki łańcuch może zachodzić niezależnie w przeciwnych kierunkach (w przypadku działania pola magnetycznego, powodującego rozszczepienia poziomów energetycznych łańcucha lub w obecności procesów prowadzących do odwracania spinów na poszczególnych węzłach łańcucha).
- f) Zastosowanie drutu kwantowego jako efektywnego detektora stanu ładunkowego qubitu. W zależności od miejsca podłączenia qubitu z konkretnym węzłem łańcucha układ taki wykazywał bardzo słabą dekoherencję. Ponadto, krótki, zgięty łańcuch atomowy został przeze mnie wykorzystany do modelowania wierzchołka ostrza STM, który posiadał nadmiarowy ładunek. Obliczenia przewodnictwa STM z wykorzystaniem takiego ostrza wykazywały zadawalającą zgodność z wynikami eksperymentalnymi STM.

Badania własności elektrycznych mają ważne znaczenie z punktu widzenia ewentualnych zastosowań. Na przykład stabilne łańcuchy atomowe są najcieńszymi z możliwych przewodnikami prądu elektrycznego i mogą być wykorzystywane jako elementy obwodów elektrycznych (niektóre z nich są wytwarzane i badane w temperaturach pokojowych). Na bazie regularnych łańcuchów atomowych można zbudować nanotranzystor, bramkę logiczną, elementy pamięci komputerowej czy pompę ładunkowo-spinową. Należy podkreślić, że kontrolowane wytwarzanie takich układów daje możliwości ich wielokrotnego badania oraz poszukiwania nowych zjawisk i zastosowań drutów kwantowych.

5. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo - badawczych (artystycznych).

a) Przed uzyskaniem stopnia doktora

W roku akademickim 1993/1994 rozpocząłem studia na Wydziale Matematyki i Fizyki UMCS w Lublinie na kierunku fizyka. Jako specjalizację wybrałem fizykę ciała stałego. Pracę magisterską zatytułowaną „*Wpływ korelacji elektronowych na wyminę ładunku w zderzeniach atomów z powierzchnią*” napisałem w Zakładzie Teorii Fazy Skondensowanej Instytutu Fizyki UMCS pod kierunkiem prof. dr. hab. Ryszarda Taranko i obroniłem w lipcu 1998r. Dotyczyła ona badań zależnych od czasu procesów wymiany ładunku, jakie zachodzą przy odbiciu wiązki atomowej od powierzchni lub w zjawiskach chemisorpcji i fizysorpcji. Badania te pozwoliły mi zapoznać się z metodami obliczeniowymi zależnymi od czasu jak np. metoda operatora ewolucji oraz równań ruchu dla funkcji korelacyjnych oraz opanować metody numeryczne rozwiązywania układów równań różniczkowo-całkowych. Studia na kierunku fizyka ukończyłem z wyróżnieniem i podjąłem decyzję o dalszej kontynuacji badań w dziedzinie fizyki ciała stałego. W tym samym roku zdałem egzaminy wstępne i zostałem studentem Studium Doktoranckiego w Instytucie Fizyki UMCS.

Podczas studiów fizycznych szczególnie zainteresowała mnie analiza zespolona i jej zastosowanie w opisie zjawisk fizycznych i rozwiązaniach wielu problemów obliczeniowych, które w przestrzeni zespolonej wydawały się dość proste. Chcąc poszerzyć swoją wiedzę z tego zakresu w roku 1995 rozpocząłem studia na kierunku matematyka (jako drugi kierunek). Studia te ukończyłem z wynikiem bardzo dobrym w roku 1999 broniąc pracę magisterską pt. „*Niektóre zastosowania calek zespolonych*”, którą wykonałem w Zakładzie Funkcji Analitycznych Instytutu Matematyki UMCS pod kierunkiem dr. hab. Józefa Waniurskiego.

W tym samym czasie na studiach doktoranckich, pod kierunkiem prof. dr. hab. Ryszarda Taranko, prowadziłem już badania dotyczące transportu elektronowego przez kropkę kwantową w przypadku stacjonarnym, jak i w zmiennych w czasie polach zewnętrznych. Celem pracy było zbadanie wpływu korelacji elektronowych, struktury energetycznej elektrod oraz dodatkowego, bezpośredniego sprzężenia pomiędzy elektrodami na stacjonarny i zależny od czasu transport elektronowy przez kropkę kwantową. Wpływ korelacji elektronowych na zjawiska transportu zbadaliśmy przy użyciu formalizmu nierównowagowych funkcji Greena. W przypadku stacjonarnym uwzględniliśmy korelacje elektronowe dla kropek słabo sprzężonych z elektrodami i otrzymaliśmy efekt blokady kulombowskiej. Obliczyliśmy również zależny od czasu prąd płynący przez kropkę kwantową i ładunek na niej zlokalizowany dla korelacji elektronowych w przybliżeniu średniego pola. Dla kropki kwantowej umieszczonej w zmiennych w czasie zewnętrznych polach pokazaliśmy, że wierzchołki konduktancji różniczkowej ulegają rozszczepieniu w funkcji napięcia źródło-dren. Ponadto ładunek na kropce przejawia na przemian rozwiązania spolaryzowane spinowo (ferro- i paramagnetyczne) w zależności od

korelacji U. Stosując metodę operatora ewolucji uwzględniliśmy wpływ struktury elektronowej elektrod i brzegów pasm energetycznych na zależny od czasu transport. Obliczenia przeprowadzone dla prostokątnej gęstości stanów elektrod oraz z wierzchołkiem w środku pasma wskazują na duże różnice w wartościach prądów i ładunków w porównaniu z wynikami otrzymanymi dla bezstrukturalnej gęstości stanów. Były to jedne z pierwszych w literaturze badań procesów zależnych od czasu uwzględniające strukturę pasmową elektrod (wyjście poza przybliżenie szerokiego pasma, WBL). Metodą operatora ewolucji zbadany został także wpływ efektów interferencyjnych występujących w układzie kropki kwantowej sprzężonej z elektrodami z dodatkowym, bezpośrednim kanałem tunelowania (mostem). Wyprowadzone zostały analityczne formuły na zależny od czasu ładunek kropki i prąd płynący w układzie. Dla niezerowych sprzężeń pomiędzy elektrodami dużą rolę odgrywiają efekty interferencyjne, które przejawiają się w charakterystykach prądowo-napięciowych układu – struktury wierzchołków przewodnictwa różniczkowego są typu rezonansu Fano.

Badania prowadzone przeze mnie podczas studiów doktoranckich (pod kierunkiem prof. dr. hab. Ryszarda Taranko oraz przy współpracy z dr hab. Ewą Taranko) zaowocowały publikacjami [A1, A2, A12]. Część wyników pracy doktorskiej została wykorzystana w publikacjach późniejszych, będących kontynuacją badań nad transportem elektronowym w układach z kropką kwantową [A3, A4, A6]. Studia doktoranckie ukończyłem w roku 2002 publiczną obroną pracy doktorskiej pt. „*Transport elektronowy w układach z kropką kwantową*”.

b) Po uzyskaniu stopnia doktora

Zależny od czasu transport elektronowy w układach z kropką kwantową

W publikacjach [A3, A4, A6, A13, A17] zajmowałem się badaniami procesów zależnych od czasu w układach z kropką kwantową. W referacie podam najciekawsze wyniki tych badań opisanych w wybranych pracach.

Publikacje [A3, A4, A6, A13] są kontynuacją badań prowadzonych w czasie powstawania mojej rozprawy doktorskiej i zawierają część wyników opisanych w doktoracie. Prace [A3] i [A4] dotyczą badań transportu elektronowego przez kropkę sprzężoną z elektrodami z dodatkowym, bezpośrednim kanałem tunelowania dla elektronów (nieelastyczne rozpraszanie). W takich układach wierzchołek przewodnictwa elektrycznego związany z konkretnym stanem na kropce kwantowej jest asymetryczny. W pracy [A3] pokazaliśmy, że wierzchołki przewodnictwa ‘rozmywają się’ w obecności zewnętrznego pola mikrofalowego a bezpośredni prąd płynący pomiędzy elektrodami zaburza symetrię tych wierzchołków. W publikacji [A4], wykorzystując metodę operatora ewolucji, wyprowadziliśmy analityczne formuły na zależny od czasu ładunek kropki i prąd płynący z jednej z elektrod. Wykazaliśmy ponadto, że nie tylko główny

wierzchołek przewodnictwa staje się asymetryczny przy bezpośrednim sprzężeniu pomiędzy elektrodami, ale podobnej modyfikacji podlegają wierzchołki boczne, jeśli do układu przyłożone jest zmienne w czasie harmoniczne pole zewnętrzne. Modyfikacja tych wierzchołków związana jest z występowaniem w układzie rezonansu typu Fano. Publikacja [A6] dotyczy badań zależnego od czasu transportu przez kropkę kwantową sprzężoną z wieloma elektrodami. Układ taki daje duże możliwości sterowania prądami płynącymi pomiędzy elektrodami. W pracy podaliśmy analityczne wyrażenia na prądy płynące w układzie. Wykazaliśmy, że w obecności bezpośrednich sprzężeń pomiędzy elektrodami lorentzowski (symetryczny) kształt wierzchołków przewodnictwa przechodzi w całkowicie asymetryczny, ale dla bardzo silnych sprzężeń, wskutek efektów interferencyjnych, znów staje się symetryczny. Bardzo ciekawe wyniki uzyskaliśmy dla przypadku zmiennych w czasie barier potencjału pomiędzy kropką i trzema elektrodami, gdzie (w przeciwieństwie do kropki połączonej z dwiema elektrodami) występuje tzw. system trójstanowy. Prądy w takim układzie zmieniały się periodycznie z wartości ujemnych na dodatnie oraz z wartości dodatnich lub ujemnych na zerowe (brak prądu płynącego przez kropkę). Omówione zostały także zależności czasowe prądów (przy uwzględnieniu różnej geometrii sprzężeń) płynących po nagłym, natychmiastowym podłączeniu trzeciej elektrody do układu z kropką kwantową.

W publikacji [A17], wspólnie z prof. dr. hab. P. Hänggim oraz dr. hab. S. Kohlerem, badaliśmy prądy płynące przez układ podwójnej kropki kwantowej połączonej z elektrodami i poddanej działaniu zmiennych w czasie harmonicznym pól zewnętrznych z pewnym przesunięciem fazowym. Badania wykonałem podczas mojego pobytu na stypendium Humboldta w Instytucie Fizyki na Uniwersytecie Augsburgskim w Niemczech. Wykonane przez mnie obliczenia wykazały istnienie wierzchołków bocznych w strukturze przewodnictwa elektrycznego pochodzących nie tylko od wierzchołka głównego (tj. wierzchołka przewodnictwa dla układu bez działania pól zewnętrznych), ale pojawiających się od istniejących już wierzchołków bocznych. Analizowaliśmy również efekt łamania symetrii czasowych w takim układzie i ich wpływ na strukturę transmitancji. Pokazaliśmy, że w obecności dwóch lub więcej pól zewnętrznych układ z podwójną kropką kwantową może stanowić efektywną pompę elektronową.

Detekcja stanu ładunkowego qubitów

Natychmiastowe przyłączenie do układu, przez który płynie prąd, zaburzenia w postaci domieszki czy adatomu powoduje pojawienie się oscylacji prądu w czasie. Oscylacje te zanikają z czasem i nie występują już, gdy układ osiąga stan równowagowy. Zagadnieniem tym zajmowałem się w publikacji [A5], gdzie do kilkuatomowego układu dołączany był atom innego pierwiastka. Pojawiały się wtedy szybko gasnące oscylacje prądu, których amplituda zależała od parametrów opisujących węzeł zaburzający. Interesującym było również zagadnienie reakcji

prądu płynącego w takim układzie, jeśli zaburzeniem jest qubit oddziałujący elektrostatycznie z układem centralnym. Rolę kwantowego bitu (qbitu) mogą pełnić dwie sprzężone kropki kwantowe stanowiące kwantowy układ dwupoziomowy. W publikacji [A11], wspólnie z prof. dr. hab. Ryszardem Taranko, badaliśmy dynamikę takiego qbitu podłączonego do detektora w różnych konfiguracjach geometrycznych. Detektor stanowił układ dwóch węzłów (kropek kwantowych) umieszczony pomiędzy elektrodami. W obliczeniach zastosowaliśmy metodę równań ruchu dla odpowiednich funkcji korelacyjnych, a pojawiające się w rachunkach funkcje korelacyjne wyższych rzędów zostały rozszczepiane według procedury porównywalnej z tzw. przybliżeniem Hubbard I z tym, że zastosowanej do procesów zależnych od czasu. Celem badań było znalezienie optymalnej konfiguracji geometrycznej qubit-detektor, dla której pomiar stanu ładunkowego qbitu będzie możliwy przez długi czas (mała dekoherencja). Rozpatrzone zostały więc konfiguracje równoległa i prostopadła qbitu (względem detektora), jak również połączenia qbitu z jedną lub z dwiema kropkami detektora. W wyniku przeprowadzonych badań stwierdziliśmy, że najlepsze dopasowanie pomiędzy prądem detektora i oscylacjami ładunku w qubicie zachodzi dla konfiguracji równoległej z korelacjami elektronowymi pomiędzy wszystkimi kropkami w układzie (z uwzględnieniem tzw. korelacji krzyżowych). Słaba dekoherencja zachodzi również w układzie qbitu połączonego z pojedynczą kropką detektora w przypadku asymetrycznych sprzężeń detektor-elektrody (ale tylko dla małych napięć źródłodren). Kolejnym ważnym rezultatem tej pracy było wykazanie, iż pomiar stanu ładunkowego qbitu może zostać odtworzony na podstawie procedury impulsowego włączania i wyłączania oddziaływania qubit-detektor oraz pomiaru asymptotycznego prądu detektora. Zgodność pomiędzy oscylacjami ładunku na qubicie i mierzonym prądem asymptotycznym jest bardzo zadowalająca.

Równoległe do badań opisanych w pracy [A11] prowadziłem obliczenia dynamiki zmian stanu ładunkowego qbitu sprzężonego z łańcuchem węzłów atomowych (kropek kwantowych). W tym przypadku detektorem ładunku na qubicie jest drut kwantowy. Badania te opisane zostały w publikacji [H15] i zostały włączone do cyklu głównego prac w rozprawie habilitacyjnej, jako przykład zastosowania drutów kwantowych w operacjach na qubitach. Wyniki zawarte w tych pracach mogą mieć duże znaczenie w doświadczeniach z wykorzystaniem qubitów, w szczególności przy odczycie stanu ładunkowego na qubicie.

Eksperymentalne i teoretyczne badania przewodnictwa elektrycznego metalicznych układów niskowymiarowych na powierzchni Si.

Rozpoczynając swoją pracę naukową w Zakładzie Fizyki Powierzchni i Nanostruktur IF UMCS postanowiłem zająć się zjawiskami przepływu prądu w układach jedno i dwuwymiarowych. Zakład ten dysponuje zaawansowaną technologicznie aparaturą pozwalającą badać własności elektryczne różnych układów niskowymiarowych. W celu poznania potencjalnych możliwości badawczych aparatury do pomiaru przewodnictwa elektrycznego, rozpocząłem cykl badań eksperymetalnych pod kierunkiem dr. hab. Zbigniewa Korczaka, prof. nadzw., w pracowni badań własności elektrycznych IF UMCS. Dla fizyka-teoretyka stanowiło to duże i niezwykle interesujące wyzwanie. W początkowym etapie poznałem technologię ultrawysokiej próżni (10^{-11} bara) i niskich temperatur oraz opanowałem technikę dyfrakcji wysokoenergetycznych elektronów RHEED, pozwalającą kontrolować *in-situ* jakość badanej powierzchni. Eksperymenty wymagały właściwego przygotowania podłoża próbki jakim była powierzchnia krzemu Si(111) w rekonstrukcji tzw. 7×7 lub powierzchnia krzemu modyfikowana złotem Si(111)/Au - obie rekonstrukcje powierzchni otrzymywałem poprzez odpowiednią zmianę wartości prądu płynącego przez próbkę Si lub Si z naniesionymi atomami Au (tzw. grzanie oporowe próbki). Następnie, przy użyciu metody epitaksji z wiązek molekularnych, w warunkach ultrawysokiej próżni oraz w niskich temperaturach, osadzone były na powierzchni atomy różnych pierwiastków takich jak Au, Ag, Pb, In i dokonywany był pomiar przewodnictwa elektrycznego (metodą czteropunktową) w czasie naparowywania atomów. Powierzchnia próbki kontrolowana była głównie przez analizę rozkładu oraz jasności plamek w układzie RHEED, a ilość naniesionego materiału przy pomocy kwarcowego miernika grubości. Wykonywaliśmy również dość czasochłonne pomiary temperaturowe przewodnictwa dla różnych wartości pokryć powierzchni. W trakcie badań obserwowany był kwantowy efekt rozmiarowy, różne reżimy przewodnictwa elektrycznego (w zależności od użytych powierzchni, rodzaju i ilości naniesionych atomów), jak również stany powierzchniowe na podłożu Si(111)/Au. Duża ilość oryginalnych wyników wymagała stworzenia teoretycznych modeli, które mogłyby opisać i wyjaśnić mechanizmy zmian przewodnictwa w badanych układach. Podjąłem się tego zadania i w każdej z cyklu publikacji [A7,A8,A9] zaproponowałem odpowiedni model teoretyczny. Wykorzystałem przy tym kwantowo-mechaniczny model Trivediego-Aschcrofta [A7] oraz metodę funkcji Greena dla atomowej sieci dwuwymiarowej [A8,A9]. Modele te pozwoliły na wyjaśnienie roli oddziaływań pomiędzy nakładanymi atomami w pojawieniu się lokalnego minimum w przewodnictwie elektrycznym dla Pb lub In przy pokryciach dużo mniejszych niż wskazuje np. teoria perkolacji (ok. 0.5ML). Z przeprowadzonych symulacji wynika, że pojedyncze atomy Pb wpływają destrukcyjnie na przewodnictwo, podczas gdy klastry dwuatomowe i większe zwiększają przewodnictwo elektryczne układu na skutek efektów interferencyjnych [A9] (zob. także [A15]). Przy czym istotną rolę w występowaniu lokalnego minimum w przewodnictwie odgrywa rodzaj podłoża (jego metaliczność) [A7]. Udało się też opisać zachowanie przewodnictwa elektrycznego podłoża Si z osadzonymi atomami Au oraz Ag (przewodnictwo maleje w zakresie do 1ML) poprzez uwzględnienie oddziaływania pomiędzy

podłożem i adatomami. Należy podkreślić, że w ramach tego modelu wyjaśnione zostało lokalne maksimum przewodnictwa elektrycznego, które obserwowaliśmy dla Au przy pokryciu ok. 0,55ML. Ten subtelny efekt związany jest z istnieniem na powierzchni stanu związanego, który dla większych pokryć (na skutek poszerzenia pasma energetycznego układu) znika, w następstwie czego przewodnictwo osiąga lokalne maksimum, [A8]. W innym eksperymencie, podczas ogrzewania wycinalnej próbki krzemu Si(335)/Au z naniesionym ołowiem (począwszy od temperatury azotowej) zaobserwowaliśmy lokalne minimum przewodnictwa w temperaturze powyżej 200K, [A9]. Efekt ten wskazywał na proces formowania się ołowianych, jednowymiarowych drutów w kierunku uskoków powierzchni krzemu Si(335). W pracy tej modelowałem quasi-dwuwymiarowy układ atomów w celu wyjaśnienia obserwowanych zmian przewodnictwa elektrycznego badanej próbki. Zaproponowany model teoretyczny (metoda funkcji Greena) zadowalająco opisywał jakościowe zmiany przewodnictwa w procesie formowania się łańcuchów ołowiu, [A9].

Badania opisane w wymienionych powyżej pracach wskazują jak ważny w określeniu własności elektrycznych układu jest rodzaj podłoża oraz ilość materiału naniesionego na podłoże. Są one istotne z punktu widzenia zastosowań układów 2D w nanoelektronice (bramki logiczne, elementy pamięci, nanotranzystory) i będą kontynuowane w przyszłości.

Badania z wykorzystaniem mikroskopu STM

W Zakładzie Fizyki Powierzchni i Nanostruktur IF UMCS jednym z ważniejszych przyrządów do badania własności elektrycznych oraz topografii powierzchni jest zmiennotemperaturowy skaningowy mikroskop tunelowy (STM). Duża ilość oryginalnych wyników eksperymentalnych uzyskanych w badaniach STM przez prof. dr. hab. Mieczysława Jałochowskiego i współpracowników wymagała stworzenia lub zaadaptowania odpowiednich modeli teoretycznych. Zdecydowałem się wziąć udział w interpretacji wyników tych badań (dotyczących łańcuchów atomowych, metalicznych wysp, powierzchni Si z subatomowym pokryciem innymi atomami), a rezultatem tej współpracy są teoretyczno-eksperymentalne publikacje. Prace, które dotyczyły badań STM łańcuchów atomowych zostały włączone do cyklu głównego prac w postępowaniu habilitacyjnym [H3, H6, H8, H12].

W teoretycznej publikacji [H12] zamodelowałem wierzchołek ostrza STM jako zgięty, krótki łańcuch atomowy sprzężony z metaliczną elektrodą. Przeprowadzone obliczenia teoretyczne wykazały, że wierzchołek ostrza mikroskopu STM zakończony pojedynczym atomem posiada nadmiarowy ładunek, którego wielkość zależy od kąta rozwarcia ostrza. Wyniki tych badań zostały wykorzystane w publikacji [A10]. Eksperymentalne badania topografii powierzchni Si(111)-6x6Au z wyspami Ag przeprowadzone przez prof. dr. hab. Mieczysława

Jałochowskiego wykazały zmianę jakości ostrza STM podczas skanowania, co prowadziło do pogorszenia rozdzielczości otrzymywanych obrazów. Efekt ten występuje najczęściej na skutek dołączenia się lub odłączenia atomu (lub grupy atomów) od ostrza STM. Wykonane badania spektroskopowe ujawniły dodatkowy wierzchołek widoczny na krzywej przewodnictwa różniczkowego dla 'ostrego' ostrza STM, a obliczenia jakie wykonałem metodą funkcji Greena w pełni potwierdziły wyniki eksperymentalne (istnienie stanu elektronowego na ostrzu poniżej energii Fermiego).

Topograficzne badania powierzchni mikroskopem STM były również wykorzystywane przy analizie procesów zachodzących na płaskiej powierzchni krzemu pokrytej atomami ołowiu. W publikacji [A15], wspólnie z dr. hab. Zbigniewem Korczakiem, prof. nadzw., zajmowaliśmy się badaniami przewodnictwa elektrycznego układu złożonego z podłoża Si(111) w rekonstrukcji 7×7 , na które nakładaliśmy atomy Pb. Wykazaliśmy, że przewodnictwo takiego układu w funkcji pokrycia atomami Pb początkowo maleje, ale już dla pokryć rzędu 0,2ML zaczyna szybko wzrastać. Zmierzona przez prof. dr. hab. Mieczysława Jałochowskiego topografia STM takiego układu wskazywała, że dla pokryć, przy których występował wzrost przewodnictwa elektrycznego, na powierzchni istnieją już izolowane, kilkuatomowe klastery Pb. Informację tę wykorzystałem przy tworzeniu modelu teoretycznego (metoda funkcji Greena z przypadkowym rozkładem atomów na powierzchni), który dość dobrze opisał jakościowe zmiany przewodnictwa elektrycznego powierzchni Si w funkcji pokrycia atomami Pb. Należy podkreślić, że w badanym układzie ścieżka perkolacji, a więc możliwość przepływu prądu bezpośrednio przez warstwę nakładaną, pojawia się dopiero przy pokryciu ok. 0,5ML. Badania te pokazują, że mikroskop STM jest ważnym narzędziem w określaniu topografii powierzchni i tworzeniu rzeczywistych modeli teoretycznych opisujących procesy i zjawiska zachodzące na powierzchni.

Lublin 13.03.2014

Tomasz Kwapiński