AUTOREFERAT

Mariusz Krawiec

Lublin, 2012

Spis treści

I.	Dane osobowe		
II.	Przebi	eg pracy naukowej	3
	1.	Przed doktoratem	3
	2.	Po doktoracie	5
III.	Osiągnięcia będące podstawą o ubieganie się o stopień doktora habilitowanego		14
	1.	Prace będące podstawą o ubieganie się o stopień doktora habilito-	
		wanego	14
	2.	Najważniejsze wyniki prac będących podstawą o ubieganie się o	
		stopień doktora habilitowanego	16
	3.	Oświadczenia dotyczące współautorstwa prac	24
IV.	Pozostałe osiągnięcia naukowo-badawcze		31
	1.	Pozostałe publikacje w czasopismach wyróżnionych przez Journal	
		Citation Reports (JCR)	31
	2.	Inne publikacje	34
	3.	Wyjazdy i staże zagraniczne	37
	4.	Konferencje i seminaria	38
	5.	Współudział w organizacji konferencji	42
	6.	Doświadczenie edytorskie	43
	7.	Projekty badawcze	44
	8.	Recenzje prac naukowych	45
	9.	Dydaktyka	46
	10.	Propagowanie fizyki	47
	11.	Nagrody	48
V.	Statystyka		
	1.	Publikacje	49
	2.	Konferencje	49
	3.	Recenzje prac naukowych	49

KAB

I. Dane osobowe

Imię i nazwisko:	Mariusz Krawiec
Stopień naukowy:	Doktor nauk fizycznych
Wykształcenie:	tytuł magistra - 1996 Wydział Matematyki i Fizyki Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej praca magisterska: <i>Złamane symetrie w fizyce</i> promotor: prof. dr hab. Wiesław A. Kamiński
	stopień doktora - 2001 Wydział Matematyki i Fizyki Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej rozprawa doktorska: <i>Korelacje elektronowe w układach</i> <i>normalnych i nadprzewodzących</i> promotor: prof. dr hab. Karol I. Wysokiński
Przebieg pracy zawodowej:	2001-2003, staż podoktorski University of Bristol, Wielka Brytania
	2003-, adiunkt Instytut Fizyki, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej.

Whb

II. Przebieg pracy naukowej

1. Przed doktoratem

W roku 1990 rozpocząłem studia na kierunku fizyka na Wydziale Matematyki i Fizyki Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie. Po trzech latach studiów stanąłem przed wyborem specjalności, z którą wiązała się tematyka mojej pracy magisterskiej. Jako specjalność wybrałem fizykę teoretyczną, a pracę magisterską zatytułowaną *Złamane symetrie w fizyce* pisałem pod kierunkiem profesora Wiesława Andrzeja Kamińskiego. Celem pracy była próba klasyfikacji sposobów łamania symetrii w fizyce, ze szczególnym uwzględnieniem spontanicznego łamania symetrii w fizyce cząstek elementarnych oraz konsekwencji z tego płynących. W pracy tej szczegółowo przedyskutowano mechanizm Higgsa, który znalazł zastosowanie w teorii unifikującej oddziaływania słabe i elektromagnetyczne, jak również w Modelu Standardowym. Mówiąc najogólniej, mechanizm ten poprzez spontaniczne złamanie lokalnej symetrii cechowania, prowadzi do umasowienia cząstek elementarnych, a odpowiedzialnym za to jest tzw. bozon Higgsa. Niestety, do chwili obecnej nie udało się bezpośrednio potwierdzić eksperymentalnie istnienia tej cząstki.

W czerwcu 1996 roku zdałem egzamin magisterski, a kilka tygodni później zostałem słuchaczem Studium Doktoranckiego Fizyki. Było to dla mnie nowe wyzwanie, gdyż wiązało się to ze zmianą dziedziny badań na raczej odległą od tej, którą zajmowałem się do tej pory. Mianowicie, od jakiegoś czasu moje zainteresowania naukowe zaczęły ewoluować w kierunku fizyki ciała stałego.

Od października 1996 roku zaczałem badania nad opisem zjawiska nadprzewodnictwa pod kierunkiem profesora Karola Izydora Wysokińskiego. Jednak aby móc efektywnie studiować właściwości stanu nadprzewodzacego, musiałem opanować nowe techniki obliczeniowe. Były to: metoda równań ruchu dla funkcji Greena oraz metoda bozonów pomocniczych (slave boson) w ujęciu J. C. Le Guillou i E. Ragoucy ze zmodyfikowanymi regułami komutacyjnymi dla operatorów. Ponadto musiałem także poszerzyć swoją wiedzę programistyczną o nowy język programowania - FORTRAN. Po kilku tygodniach mogłem już rozpocząć badania nad zjawiskiem nadprzewodnictwa w uogólnionym modelu Hubbarda z silnymi korelacjami elektronowymi. Model ten opisuje ruch elektronów w sieci krystalicznej z bardzo silnym odpychaniem się elektronów znajdujących się na tym samym weźle $(U \to \infty)$ oraz przyciąganiem pomiędzy elektronami rezydującymi na sąsiednich węzłach. Głównym celem tych badań było otrzymanie diagramu fazowego temperatury krytycznej w funkcji koncentracji elektronów. Obliczona zależność temperatury krytycznej w funkcji koncentracji jakościowo odtwarzała istniejące dane eksperymentalne. Pierwsze częściowe wyniki tych obliczeń zostały zamieszczone w IF UMCS Annual Report już w grudniu tego samego roku [C-01]. Natomiast, pozostałe wyniki tych badań zostały opublikowane w pracach [B-02, C-02, C-03, C-07].

Na początku drugiego roku studiów doktoranckich, wspólnie z profesorem Karolem I. Wysokińskim, postanowiliśmy zająć się korelacjami elektronowymi w układach me-

zoskopowych, w szczególności w kropkach kwantowych. Wpływ na tę decyzję miały dwa fakty. Pierwszy, to pojawienie się pracy doświadczalnej na temat efektu Kondo w kropkach kwantowych połączonych z zewnętrznymi elektrodami. Efekt Kondo związany jest z formowaniem się stanu singletowego pomiędzy spinem elektronów na kropce i w elektrodach, a manifestuje się pojawieniem się rezonansu na poziomie Fermiego (E_F) w elektronowej gęstości stanów kropki oraz wzrostem, mierzonego w eksperymencie, przewodnictwa różniczkowego dla zerowego napięcia. Drugi powód, to możliwości metody bozonów pomocniczych, które idealnie nadawały się do analizy procesów fizycznych w silnie skorelowanych kropkach kwantowych, opisywanych modelem Andersona pojedynczej domieszki. Aby móc w pełni odnieść się do eksperymentu, musiałem jeszcze opanować metodę nierównowagowych funkcji Greena, która pozwalała badać właściwości układu w sytuacji gdy przez kropkę kwantową płynie prąd. Po kilku tygodniach byłem już przygotowany do studiowania efektów korelacyjnych, takich jak zjawisko Kondo, czy blokada kulombowska, w kropkach kwantowych w warunkach nierównowagowych.

Pierwszym zagadnieniem było zbadanie wpływu struktury elektronowej elektrod, w szczególności osobliwości Van Hove'a, na prąd tunelowy i przewodnictwo różniczkowe kropki kwantowej w ramach modelu Andersona pojedynczej domieszki z $U \rightarrow \infty$. Badania pokazały, że charakterystyczne cechy struktury elektronowej elektrod przenoszone są na przewodnictwo kropki modyfikując jego kształt w nietrywialny sposób. Mianowicie, w zależności od energii, przy której występuje osobliwość Van Hove'a, przewodnictwo różniczkowe jest wzmocnione, bądź osłabione. Wyniki tych badań zostały opublikowane w pracy [B-01].

Kolejnym etapem moich badań nad kropkami kwantowymi było zastąpienie elektrod normalnych elektrodami nadprzewodzącymi i analiza wpływu nadprzewodnictwa na właściwości spektralne i transportowe takich układów. Rozważane były nadprzewodniki o różnej symetrii parametru porządku: izotropowy o symetrii typu fali s i anizotropowy o symetrii typu fali d. W zależności od symetrii parametru porządku, lokalna gęstość stanów elektronowych kropki kwantowej charakteryzowała się brakiem stanów energetycznych wokół energii Fermiego (symetria s), bądź liniową zależnością od energii w pobliżu E_F (symetria d). Takie zachowanie gęstości stanów ma także wpływ na prąd tunelowy. W przypadku kropki kwantowej połączonej z dwoma nadprzewodnikami o symetrii parametru porządku typu fali s, prąd tunelowy nie płynie dla napięć mniejszych od podwojonej wartości przerwy energetycznej, natomiast w przypadku nadprzewodnika typu fali d, prąd jest silnie tłumiony. Rezultaty tej analizy są zamieszczone w publikacjach [B-03, C-04].

Następnie zajmowałem się przypadkiem, kiedy kropka kwantowa połączona była z jednym nadprzewodnikiem i jedną elektrodą w stanie normalnym. Szczególny nacisk położony był na współzawodnictwo pomiędzy efektem Kondo i odbiciami Andreeva. Ogólnie mówiąc, odbicia Andreeva pozwalają na przepływ prądu dla napięć mniejszych od wartości przerwy energetycznej. Idea tego mechanizmu polega na tym, że elektron z metalu chcący wejść do nadprzewodnika, odbijany jest jako dziura na złączu metal normalny - nadprzewodnik, a w nadprzewodniku kreowana jest para Coopera. Efektem tego procesu jest transfer ładunku równego 2e, gdzie e jest ładunkiem elektronu, z metalu normalnego do nadprzewodnika. Przeprowadzone obliczenia pokazały, że rezonans Kondo występuje w gęstości stanów kropki, natomiast przewodnictwo różniczkowe jest silnie tłumione dla

bardzo małych napięć. Wyniki tych badań zostały opublikowane w pracach [C-04, C-05] oraz w dużej mierze posłużyły jako punkt wyjścia do dalszych badań, po uzyskaniu stopnia doktora, opublikowanych w czasopiśmie Superconductor Science and Technology [B-09].

W drugiej połowie 1999 roku rozpocząłem projekt mający na celu zaproponowanie w miarę jednoznacznego sposobu obliczania ładunku na kropce kwantowej w sytuacji, gdy płynie przez nią prąd tunelowy. O ile w przypadku równowagowym, gdy nie płynie prąd, wyznaczenie ładunku nie stanowiło problemu, o tyle w sytuacji nierównowagowej nie było jednoznacznego przepisu na jego znalezienie. Zaproponowany sposób obliczania ładunku na kropce kwantowej oparty był na metodzie równań ruchu dla nierównowagowych funkcji Greena. Szczegóły można znaleźć w pracach [B-04, C-05, C-06].

Na początku 2000 roku zająłem się kolejnym zagadnieniem, mającym na celu wyjaśnienie eksperymentalnie obserwowanego efektu Kondo w kropkach kwantowych w warunkach nierównowagowych. Mianowicie, w pewnych warunkach rezonans Kondo w przewodnictwie różniczkowym pojawia się dla napięć niezerowych. Wykonane obliczenia techniką równań ruchu dla funkcji Greena pokazały, że odpowiedź leży w asymetrii sprzężeń kropki kwantowej z lewą i prawą elektrodą. Jednak ilościowe wyniki przesunięcia nie zgadzały się z danymi eksperymentalnymi. Fakt ten był jednym z powodów, dla których wiosną 2000 roku rozpocząłem pracę nad opisem kropki kwantowej w ramach zmodyfikowanego przybliżenia NCA (non-crossing approximation). Przybliżenie NCA jest metodą diagramowa i pozwala na znalezienie energii własnych funkcji Greena operatorów bozonowych i fermionowych z odpowiednich nieprzecinających się diagramów Feynmanna. Jednym z bardziej interesujących wyników były otrzymane wyrażenia na wykładniki krytyczne bozonowych i fermionowych funkcji spektralnych, które jakościowo zgadzały się z wynikami numerycznej grupy renormalizacyjnej. Ze względu na specyfikę tej metody, implementacja numeryczna wymagała głębokiej wiedzy programistycznej. Metoda ta została wykorzystana w późniejszych publikacjach.

Studia doktoranckie zakończyłem złożeniem pracy doktorskiej zatytułowanej Korelacje elektronowe w układach normalnych i nadprzewodzących oraz jej publiczną obroną 4 stycznia 2001 roku.

2. Po doktoracie

a) University of Bristol: staż podoktorski - 2001-2003

Niespełna tydzień po obronie pracy doktorskiej, wyjechałem do Bristolu (Wielka Brytania), gdzie 11 stycznia 2001 roku rozpocząłem staż podoktorski w University of Bristol w grupie profesora Balazsa Györffy'ego. Celem wyjazdu było przeprowadzenie badań teoretycznych nad właściwościami układów ferromagnetyk - nadprzewodnik w ramach projektu *Computational Magnetoelectronics Research Training Network*, finansowanego przez Unię Europejską. Projekt ten skupiał kilkanaście wiodących ośrodków naukowych naszego kon-

tynentu, m. in. z Wielkiej Brytanii, Francji, Niemiec, Holandii, Szwecji, Austrii, Węgier i Czech. Grupa w Bristolu liczyła trzy osoby: oprócz mnie i profesora Balazsa Györffy'ego, w projekt zaangażowany był również profesor James Annett.

Moim pierwszym zadaniem było opracowanie numerycznej metody rozwiązywania równań Hartree-Focka-Gorkova w przestrzeni rzeczywistej dla układu metal normalny - nadprzewodnik z izotropową szczeliną energetyczną, opisanego hamiltonianem ciasnego wiązania. Problem był dość skomplikowany, gdyż równania te można było rozwiązać tylko metodą iteracyjną, obliczając w każdym kroku iteracyjnym wartości parametru porządku nadprzewodnika oraz koncentrację elektronów na każdym węźle sieci krystalicznej. Opracowana przeze mnie metoda doskonale nadawała się do opisu właściwości złącza metal normalny - nadprzewodnik, gdyż w naturalny sposób prowadziła do pojawienia się efektu bliskości (proximity effect), obserwowanego doświadczalnie. Zjawisko bliskości, to inaczej wnikanie par Coopera do metalu normalnego na odległość porównywalną z długością koherencji nadprzewodnika, a zarazem tłumienie korelacji nadprzewodzących po stronie nadprzewodnika. Odpowiedzialnymi za efekt bliskości są, omawiane wcześniej, odbicia Andreeva.

Pierwszym nietrywialnym wynikiem moich obliczeń było pojawienie się tzw. złącza π , w którym parametr porządku nadprzwodnika zmieniał fazę na przeciwną, przy przechodzeniu przez granicę metal normalny - nadprzewodnik, o ile w metalu normalnym istniało silne odpychanie kulombowskie. Wprowadzenie do obliczeń potencjału wektorowego doprowadziło do sytuacji, w której pojawiły się prądy spontaniczne, płynące w przeciwnych kierunkach po obu stronach granicy metal normalny - nadprzewodnik oraz pojawienie się spontanicznego pola magnetycznego, towarzyszącego tym prądom. Stan z prądem spontanicznym miał niższą całkowitą energię, a więc był prawdziwym stanem podstawowym. Oczywiście, całkowity prąd w układzie był równy zero. Prądy spontaniczne generowane były dzięki odbiciom Andreeva, które prowadziły do pojawienia się stanów związanych na poziomie Fermiego w przerwie energetycznej nadprzewodnika. W takich układach, stany o zerowej energii mogą się pojawić tylko w przypadku, gdy mamy do czynienia ze złączem π , tzn. gdy jest zmiana znaku parametru porządku na granicy metal normalny - nadprzewodnik. Wyniki te zostały zaprezentowane przeze mnie podczas konferencji w Budapeszcie we wrześniu 2001 roku.

Po powrocie z konferencji rozpocząłem już właściwe badania dotyczące projektu, a mianowicie właściwości struktur ferromagnetyk - nadprzewodnik. Odpowiednio zmodyfikowany przeze mnie program numeryczny pozwalał na badanie współzawodnictwa pomiędzy dwoma antagonistycznymi zjawiskami: ferromagnetyzmem i nadprzewodnictwem. Było to o tyle interesujące, że oprócz nadprzewodzącego efektu bliskości, pojawiał się także magnetyczny efekt bliskości, czyli wnikanie korelacji ferromagnetycznych do nadprzewodnika.

Rozwiązanie spinowo spolaryzowanych równań Hartree-Focka-Gorkova pozwoliło na uzyskanie oscylacji amplitudy parowania w funkcji grubości ferromagnetyka w kontakcie z nadprzewodnikiem, co było ściśle związane z mierzonymi oscylacjami temperatury krytycznej i gęstości stanów na poziomie Fermiego. Poza tym, podobnie jak w przypadku złącza metal normalny - nadprzewodnik, pojawiały się prądy spontaniczne, ale tym razem dzięki obecności porządku magnetycznego były spinowo spolaryzowane. Bar-

dziej szczegółowe badania doprowadziły nas do wniosku, że nie jest już konieczne istnienie odpychania kulombowskiego w obszarze nienadprzewodzącym. Badaliśmy również pojawienie się stanu z prądem spontanicznym w funkcji temperatury, określając temperaturę, przy której pojawiają się prądy oraz wpływ prądów spontanicznych na właściwości transportowe przez złącze ferromagnetyk - nadprzewodnik. Powyższe rozważania były tematami publikacji [B-06 - B-08, C-08] jak również wygłoszonych przeze mnie zaproszonych wykładów podczas kilku konferencji, m. in. w Lądku Zdroju (2002), Lancaster (2003) i Bristolu (2003).

Ostatnim zagadnieniem, w które zaangażowałem się podczas mojego pobytu w Bristolu, była próba opisu dotychczas otrzymanych wyników w podejściu semiklasycznym. Stosując regułę kwantowania Bohra-Sommerfelda, pokazałem w jaki sposób generowane są prądy spontaniczne w badanych układach. Następnym krokiem było numeryczne rozwiązanie równań Eilenbergera, opisujących układ w granicy semiklasycznej w reżimie balistycznym. Dodatkowo chcieliśmy sprawdzić wpływ nieporządku w ferromagnetyku oraz efekt zmian współczynnika transmisji warstwy łączącej ferromagnetyk z nadprzewodnikiem na generowanie pradów spontanicznych. Rozwiązanie spinowo spolaryzowanych równań Eilenbergera doprowadziło do wniosku, że nieporządek wprowadza oscylacje pradu spontanicznego w ferromagnetyku w funkcji odległości od granicy z nadprzewodnikiem, a zarazem jego tłumienie. Ostatecznie, jeżeli średnia droga swobodna jest krótsza niż grubość ferromagnetyka, prad spontaniczny zanika. Natomiast wpływ zmian współczynnika transmisji jest bardziej złożony, gdyż oprócz oczekiwanego destrukcyjnego wpływu na prąd spontaniczny, powoduje również przełączanie się układu pomiędzy stanem z prądem spontanicznym, a stanem bez prądu. Szczegółową dyskusję na ten temat zawiera praca [B-10].

Poza główną tematyką moich badań w Bristolu, nadal kontynuowałem współpracę z profesorem Karolem I. Wysokińskim. Dokończyłem opis nierównowagowego efektu Kondo w asymetrycznie sprzężonej kropkce kwantowej w przybliżeniu NCA oraz przeprowadziłem dodatkowe obliczenia związane ze współzawodnictwem efektu Kondo i odbić Andreeva w kropce kwantowej połączonej z elektrodą w stanie normalnym i elektrodą nadprzewodzącą. Zaowocowało to dwiema publikacjami: w Physical Review B [B-05] oraz w Superconductor Science and Technology [B-09].

Podczas mojego ponad dwuletniego pobytu w Bristolu, wyjeżdżałem również do innych ośrodków naukowych, współuczestniczących w projekcie *Computational Magnetoelectro*nics. Odwiedziłem m. in. Delft University of Technology (1 tydzień), gdzie miałem okazję prowadzenia wielogodzinnych konstruktywnych dyskusji na temat podejścia semiklasycznego z profesorem Yulijem V. Nazarovem. Spędziłem również jeden miesiąc w University of Twente w Enschede, gdzie w grupie profesora Paula J. Kelly'ego miałem możliwość zapoznania się z teorią rozpraszania Landauera-Büttickera i jej zastosowania do opisu transportu w heterostrukturach Pb/Cu, Pb/Ni i Pb/Co.

W czerwcu 2003 roku zakończyłem staż podoktorski w University of Bristol i wróciłem do kraju.

b) Instytut Fizyki UMCS: 2003-

W październiku 2003 roku zostałem zatrudniony na stanowisku adiunkta w Zakładzie Fizyki Powierzchni i Nanostruktur Instytutu Fizyki UMCS, kierowanym przez profesora Mieczysława Jałochowskiego.

Jako, że zakład specjalizował się w badaniach doświadczalnych nad strukturami metalicznymi na powierzchni krzemu, stanowiło to dla mnie, jako teoretyka, interesujące wyzwanie. Moim pierwszym zadaniem było uzyskanie rekonstrukcji 7×7 na powierzchni Si(111) w warunkach ultrawysokiej próżni (rzędu 10^{-11} mbar) oraz opanowanie techniki odbiciowej dyfrakcji wysokoenergetycznych elektronów (RHEED). Technika RHEED jest bardzo pomocna w badaniu struktury powierzchni, jak również w określeniu jej czystości.

Posiadając już umiejętność przygotowywania powierzchni, mogłem przejść do następnego zadania, mianowicie do poznania tajników skaningowej mikroskopii tunelowej (STM). Urządzenie, z którym zacząłem pracować, to zmiennotemperaturowy skaningowy mikroskop tunelowy wyprodukowany przez firmę Omicron, pozwalający na uzyskiwanie obrazów topograficznych powierzchni z atomową rozdzielczością w warunkach ultrawysokiej próżni. W tym samym roku potrafiłem już samodzielnie obsługiwać skaningowy mikroskop tunelowy i wykonywać pomiary zarówno topograficzne jak i spektroskopowe wytworzonych struktur na powierzchni Si oraz je analizować i interpretować.

Na początku 2004 roku przystąpiłem do badań nad powierzchniami wicynalnymi (schodkowymi) krzemu. Tematyka ta była zapoczątkowana przez grupę profesora Mieczysława Jałochowskiego w drugiej połowie lat dziewiećdziesiatych i nadal jest rozwijana. Ja zająłem się badaniami STM powierzchni Si(335) pokrytej złotem. Płaszczyzna ta powstaje poprzez ucięcie kryształu Si pod kątem 14.4° do płaszczyzny (111) w kierunku $[\bar{1}\bar{1}2]$ i składa się z tarasów (111) o szerokości $3\frac{2}{3}a_{[11\bar{2}]} = 1.22$ nm, gdzie $a_{[11\bar{2}]}$ jest odległością pomiędzy atomami Si w kierunku $[11\overline{2}]$. Czysta powierzchnia Si(335) jest nieuporządkowana. Dopiero nałożenie odpowiedniej ilości Au prowadzi do uzyskania makroskopowo jednorodnej, wysoce uporządkowanej powierzchni. Naparowanie 0.28 ML Au (1 ML odpowiada 7.83×10^{14} atomów/cm²) i wygrzanie w temperaturze około 900 K, prowadzi do otrzymania tablicy jednowymiarowych łańcuchów atomowych na makroskopowym obszarze. Zmierzona przeze mnie topografia STM powierzchni Si(335)-Au potwierdziła istnienie struktur w postaci jednowymiarowych łańcuchów atomowych. Dość zaskakującym wynikiem pomiarów było odwrócenie topografii STM łańcuchów przy zmianie polaryzacji napięcia skanowania. Aby wyjaśnić takie zachowanie, wspólnie z doktorem Tomaszem Kwapińskim, zamodelowaliśmy badany układ, który składał się z ostrza STM oraz monoatomowego łańcucha na powierzchni. Przeprowadzone przeze mnie obliczenia numeryczne pradu tunelowego, doprowadziły do wniosku, że odwrócenie topografii STM ma nature czysto elektronowa i związane jest z różnym rozkładem energetycznym współczynnika transmisji. Wyniki te zostały opublikowane w pracy [A-01].

Pod koniec 2004 roku rozpocząłem doświadczenia z inną powierzchnią wicynalną -Si(557). Powierzchnia ta charakteryzuje się mniejszym kątem nachylenia (9.5°) do płaszczyzny (111) niż powierzchnia Si(335), a co za tym idzie, posiada szersze tarasy ($5\frac{2}{3}a_{[11\bar{2}]} =$ 1.88 nm). Optymalne pokrycie Au, przy którym powierzchnia Si(557) jest makroskopowo uporządkowana, wynosi 0.2 ML. Przeprowadzone przeze mnie pomiary topografii STM

wykazały istnienie dwóch nierównoważnych monoatomowych łańcuchów w obrębie jednego tarasu. Jeden z łańcuchów wykazywał odwrócenie topografii STM przy zmianie polaryzacji napięcia tunelowania, a drugi nie. Ponownie, wspólnie z doktorem Tomaszem Kwapińskim, zamodelowaliśmy badany układ, uwzględniając fakt istnienia dwóch różnych łańcuchów. Uzyskane przeze mnie wyniki obliczeń numerycznych wyjaśniały obserwowane zmiany topografii STM (lub ich brak) w zależności od parametrów modelu, głównie od wartości energii poziomów jednocząstkowych atomów tworzących dany łańcuch. Te różne wartości energii doprowadziły nas do konkluzji, że jeden z łańcuchów jest utworzony z atomów Au, a drugi z atomów Si. Szczegółową dyskusję na ten temat zawiera publikacja [A-02].

Kolejnym moim zadaniem było wyjaśnienie zjawiska ujemnej rezystancji różniczkowej, obserwowanej w niektórych eksperymentach z wykorzystaniem skaningowej spektroskopii tunelowej (STS) wysp Pb na podłożu Si(111) 6×6 -Au. Z wykonanych przeze mnie obliczeń w ramach modelu ciasnego wiązania, które zostały opublikowane w pracy [B-12], wynikało, że efekt ujemnej rezystancji jest ściśle związany z kształtem ostrza STM.

W 2006 roku przybyło do naszego zakładu dwoje doktorantów: Agnieszka Stępniak i Paweł Nita, którzy mieli zajmować się skaningową mikroskopią tunelową. Wspólnie z profesorem Mieczysławem Jałochowskim wprowadziliśmy ich w tę tematykę. Od tego czasu w całości poświęciłem się badaniom teoretycznym nad właściwościami nanostruktur na powierzchniach Si. Na początku zajmowałem się zjawiskami termoelektrycznymi w scaningowej mikroskopii tunelowej monoatomowych łańcuchów. Przeprowadzone przeze mnie obliczenia wielkości termoelektrycznych w ramach modelu ciasnego wiązania wskazały na możliwość lokalnego pomiaru siły termoelektrycznej nanostrukur powierzchniowych. W szczególności, okazało się, że oscylacje termosiły w funkcji poziomego położenia ostrza nad powierzchnią nie pokrywają się z obrazem topograficznym. Wyniki te opublikowane zostały w pracy [B-24]. Następnie, wspólnie z doktorem Tomaszem Kwapińskim badaliśmy modyfikacje prądu tunelowego w skaningowej mikroskopii tunelowej atomowych łańcuchów, wywołane obenością domieszek sprzężonych z łańcuchami. W zależności od sposobu sprzężenia domieszki z łańcuchem, prąd tunelowy i przewodnictwo może być wzmacniane lub tłumione. Zagadnieniu temu poświęcona jest publikacja [B-25].

Niestety, badania teoretyczne z wykorzystaniem modelu ciasnego wiązania nie spełniły moich oczekiwań naukowych. Zbyt duża liczba wolnych parametrów modelu, a co za tym idzie, niejednoznaczność w dopasowaniu do istniejących danych doświadczalnych oraz niemożność przewidywań wyników nowych eksperymentów, skierowały mnie ku innym narzędziom teoretycznym. W 2007 roku zacząłem zajmować się obliczeniami z pierwszych zasad (ab-initio) w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT). Możliwości tej nowej dla mnie techniki obliczeniowej umożliwiały interakcję z eksperymentem. Nie tylko pozwalały na jednoznaczny opis wyników doświadczalnych, ale również stanowiły nieocenioną pomoc w planowaniu i realizacji nowych przedsięwzięć eksperymentalnych.

Pierwsze zagadnienia, które zrealizowałem z wykorzystaniem teorii DFT, były związane z powierzchnią Si(335)-Au. Przeprowadzone przeze mnie obliczenia, pozwoliły potwierdzić poprawność istniejącej w literaturze propozycji modelu strukturalnego tej powierzchni, który charakteryzował się obecnością łańcucha Au wbudowanego w taras Si(335). Poza tym, z całą pewnością można było stwierdzić, że obserwowane w STM struktury 1D po-

chodzą od atomów Si na brzegach tarasów. Bazując na uzyskanym modelu strukturalnym powierzchni Si(335)-Au, mogłem również wyjaśnić wyniki doświadczeń STM i ARPES. W szczególności obliczona struktura pasmowa powierzchni Si(335)-Au w pełni odzwierciedlała dane doświadczalne, a pasma energetyczne widoczne w ARPES pochodziły od hybrydyzacji atomów Au z sąsiadującymi atomami Si oraz niewysyconych wiązań atomów Si na brzegach tarasów. Wyniki te dyskutowane są w pracy [A-03].

Mając do dyspozycji już model strukturalny powierzchni Si(335)-Au, mogłem zająć się opisem właściwości łańcuchów utworzonych przez atomy innych pierwiastków. Motywacją do tych badań stanowiły wyniki eksperymentów przeprowadzonych w naszej grupie. Topografia STM powierzchni Si(335)-Au/Pb wskazywała na istnienie dwóch nierównoważnych struktur jednowymiarowych, a dane ARPES na pojawienie się dodatkowego pasma w strukturze elektronowej. Przeprowadzone przeze mnie obliczenia DFT w pełni wyjaśniąły wyniki tych doświadczeń. Obserwowane dwa łańuchy, to atomy Si na krawędzi tarasów oraz atomy Pb zaadsorbowane na środku tarasu. Natomiast dodatkowe pasmo energetyczne pochodzi od łańcucha Pb. Wyniki tych obliczeń były prezentowane na kilku konferencjach, a także zostały opublikowane w pracy [A-04].

W 2009 roku moje zaintersowania naukowe rozszerzyły się na powierzchnię Si(111). Początkowo zajmowałem się kwantowym efektem rozmiarowym w warstwach Pb na powierzchni Si(111)6×6-Au. Głównym celem obliczeń było określenie wpływu podłoża na stany studni kwantowych oraz opis oscylacji grubości warstw Pb obserwowanych w STM. Okazało się, że uwzględnienie podłoża w znaczący sposób modyfikowało strukturę elektronową warstw Pb i w rezultacie doprowadziło do pełnej zgodności struktury pasmowej z danymi eksperymentalnymi. Wyniki tych badań były tematem wygłoszonego przeze mnie zaproszonego wykładu na międzynarodowej konferencji w Wąsowie w lipcu 2009 roku.

Następny temat dotyczył również powierzchni Si(111), ale tym razem z rekonstrukcją 5×2 -Au. Jedną z charakterystycznych cech tej rekonstrukcji jest obecność adatomów Si, które tworza supersieć z okresowościa 5×4 . Jednak tylko połowa dozwolonych miejsc jest zapełniona przez adatomy Si. Celem projektu była próba wytworzenia perfekcyjnie uporzadkowanej supersieci z wykorzystaniem innych atomów. Wykonane przez mgr Agnieszkę Stępniak pomiary topografii STM powierzchni $Si(111)5 \times 2$ -Au udekorowanej atomami In doprowadziły do interesujących rezultatów. Okazało się, że niektóre adatomy sa niewidoczne przy ujemnych napieciach tunelowania. Przeprowadzone przeze mnie obliczenia struktury atomowej tej powierzchni pokazały, że w wyniku adsorpcji atomów In, mamy do czynienia z trzema rodzajami struktur: adatomami Si, adatomami In oraz związanymi parami Si-In. Zagadnienie to jest tematem pracy [A-05]. Projekt ten jest nadal rozwijany, głównie pod katem wytwarzania supersieci i domieszkowania elektronowego powierzchni, z wykorzystaniem atomów innych pierwiastków, takich jak Pb czy Ag. W przypadku atomów Pb, zarówno wyniki STM, jak i obliczenia DFT pokazują, że atomy Pb adsorbują w położeniach adatomów Si. W rezultacie otrzymuje się perfekcyjnie uporządkowaną supersieć 5×4 adatomów. Dodatkowo obecność atomów Pb powoduje przesunięcie struktury pasmowej w stronę większych energii wiązania, co świadczy o domieszkowaniu elektronowym oraz o elektronowej naturze stabilizowania powierzchni $Si(111)5 \times 2$ -Au. Wyniki tych badań zostały zamieszczone w pracy [A-11]. Scenariusz elektronowej stabilizacji tej powierzchni potwierdzają także wyniki badań z atomami Ag,

które prezentowałem na międzynarodowej konferencji we Wrocławiu w sierpniu 2011 roku.

W połowie 2009 roku rozpocząłem projekt związany z adsorpcją atomów Ag na powierzchni Si(557)-Au. Zmierzona przez profesora Mieczysława Jałochowskiego topografia STM powierzchni z zaadsorbowanymi atomami Ag niewiele się różniła od czystej powierzchni Si(557)-Au, natomiast widoczne były różnice we właściwościach elektronowych. Moim zadaniem było opracowanie modelu strukturalnego oraz wyjaśnienie obserwowanych efektów. Wnioski płynące z przeprowadzonych przeze mnie obliczeń DFT ujawniły zjawisko domieszkowania elektronowego powierzchni Si(557)-Au przez adatomy Ag. Jest to pierwszy przykład w literaturze, dotyczący domieszkowania elektronowego układów jednowymiarowych. Rezultaty tych badań zostały opublikowane w pracach [A-07, A-08].

Mniej więcej w tym samym czasie zająłem się kolejną powierzchnią wicynalną, mianowicie Si(553)-Au. Powierzchnia ta powstaje poprzez ucięcie kryształu Si(111) pod kątem 12.3°, ale w kierunku przeciwnym niż w przypadku powierzchni Si(335) i Si(557). Szerokość tarasów tej powierzchni, równa $4\frac{1}{3}a_{[11\bar{2}]} = 1.44$ nm, sytuuje ją pomiędzy powierzchniami Si(335) i Si(557). Początkowo przyjmowana ilość złota, która prowadziła do uporządkowania powierzchni, była określona jako 0.24 ML. Jednak ostatnie pomiary pokrycia tej powierzchni atomami Au, jak również nieudane próby uzyskania poprawnego modelu strukturalnego, doprowadziły do konkluzji, że złota jest dwa razy więcej, niż początkowo sugerowano. Wszystko to skłoniło mnie do głębszego zainteresowania się tym zagadnieniem. Po wykonaniu odpowiednich obliczeń, byłem w stanie zaproponować model strukturalny powierzchni Si(553)-Au, który odtwarzał topografie STM i strukture elektronową mierzoną w doświadczeniach fotoemisyjnych. Cechą charakterystyczną tego modelu są podwójne łańcuchy Au, które odpowiedzialne są także za występowanie dwóch pasm energetycznych, obserwowanych w doświadczeniach ARPES, przy czym jedno z nich jest rozszczepione ze względu na oddziaływanie spin-orbita. Szczegóły tego modelu oraz struktury elektronowej dyskutowane są w pracy [A-06]. Poprawność tego modelu została później potwierdzona w doświadczeniu z wykorzystaniem dyfrakcji promieni X, a także przez niezależne obliczenia DFT.

Mając do dyspozycji poprawny model powierzchni Si(553)-Au, na początku roku 2010 rozpocząłem badania nad adsorpcją atomów innych pierwiastków na powierzchni Si(553)-Au. Równolegle mgr Paweł Nita rozpoczął próby wytworzenia łańcuchów Pb na tej powierzchni. Wyniki badań STM wskazywały na możliwość formowania się złożonych łańcuchów Pb. W przypadku pokrycia Pb równym 0.35 ML, obserwuje się podwójne łańcuchy Pb na każdym z tarasów. Podobnie jak miało to miejsce w przypadku nierównoważnych struktur Si na powierzchni Si(557)-Au, jeden z łańcuchów Pb wykazuje odrócenie obrazu topograficznego przy zmianie polaryzacji napięcia tunelowania, a drugi nie. Obliczona przeze mnie struktura atomowa takich układów doprowadziła do wniosku, że za odwrócenie topografii STM odpowiedzialna jest dimeryzacja atomów Au, z którymi związane są atomy Pb jednego łańcucha. Natomiast drugi łańcuch Pb znajduje się na brzegu tarasu i nie obserwuje się w nim podobnego efektu. Szczegóły tych rozważań zamieszczone są w pracy [A-10].

Ostatnim zagadnieniem, nad którym pracuję od początku 2011 roku jest zjawisko silnie anizotropowej dyfuzji atomów na powierzchni Si(553)-Au. Motywacją do tych badań jest zaobserwowana w temperaturze pokojowej przez mgr. Pawła Nitę dyfuzja atomów

Pb na powierzchni Si(553)-Au. Obliczona przeze mnie mapa adsorpcji atomów Pb na tej powierzchni oraz bariery dyfuzyjne pozwoliły wytłumaczyć wyniki eksperymentów STM. Na brzegach tarasów tworzą się jednowymiarowe kanały dyfuzyjne dla atomów Pb, ograniczone w kierunku prostopadłym przez bariery potencjału ponad 1 eV. Zagadnieniu temu poświęcona jest publikacja [A-09], a problem dyfuzji jednowymiarowej na powierzchni Si(553)-Au jest nadal przedmiotem moich badań w ramach finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki projektu *Dyfuzja atomów w jednowymiarowych kanałach*, którego jestem kierownikiem.

Od początku mojej pracy w Instytucie Fizyki UMCS, poza główną tematyką badań dotyczaca struktur jednowymiarowych na powierzchniach Si, w kregu moich zainteresowań naukowych pozostawała nadal problematyka zainicjowana w czasie studiów doktoranckich i podczas mojego pobytu w Bristolu. Wpólnie z profesorem Karolem I. Wysokińskim badałem silnie skorelowane kropki kwantowe pod katem właściwości termoelektrycznych. Celem projektu było określenie w jakich wielkościach termoelektrycznych najwyraźniej manifestuje się efekt Kondo. Okazało się, że najlepsza wielkościa jest siła termoelektryczna oraz termoelektryczna dobroć układu. Zaowocowało to trzema publikacjami [B-14, B-17, B-20]. Kontynuowaliśmy również badania związane z kropkami kwantowymi i nadprzewodzacymi elektrodami, wyniki których zamieszczone są w pracach [C-09, C-11]. Temat pokrewny, mianowicie domieszkę w nadprzewodniku rozwijałem z doktorem habilitowanym Grzegorzem Litakiem z Politechniki Lubelskiej. Szczególna uwage skupiliśmy na powstawaniu stanów zwiazanych w przerwie energetycznej nadprzewodników, zarówno klasycznych jak i wysokotemperaturowych. Wyniki tych badań zostały zamieszczone również w trzech pracach [B-11, B-16, B-22]. Razem z doktorem Tomaszem Kwapińskim rozważałem wpływ korelacji elektronowych na transport przez łańcuch monoatomowy. Okazało się, ze korelacje w istotny sposób modyfikują przewodnictwo, a przy pewnych warunkach prowadzą do spinowo spolaryzowanych rozwiązań [B-13]. Kontynuowałam także współprace z profesorem Balazsem Györffym i profesorem Jamesem Annettem na temat generowania pradów spontanicznych w strukturach ferromagnetyk-nadprzewodnik [B-15, B-18, C-10, C-12]. Badałem między innymi wpływ umieszczenia warstwy metalu normalnego pomiędzy ferromagnetykiem a nadprzewodnikiem na powstawanie prądów spontanicznych. Nawiązałem współpracę z profesorem Maciejem Maśką i profesorem Marcinem Mierzejewskim z Uniwersytetu Ślaskiego w Katowicach, która miała na celu wyjaśnienie obserwowanej asymetrii w spektroskopii tunelowej nadprzewodników wysokotemperaturowych. Zaproponowany przez nas mechanizm prowadzacy do tej asymetrii zwiazany jest ze sprzężeniem nadprzewodnika z elektrodami STM. Zagadnienie to jest tematem pracy [B-21]. Prowadziłem również samodzielne badania na temat właściwości transportowych i termoelektrycznych kropek kwantowych sprzeżonych z ferromagnetycznymi i nadprzewodzącymi elektrodami. Między innymi w ramach techniki równań ruchu dla funkcji Greena wskazałem na możliwość występowania szczatkowego efektu Kondo w kropkach kwantowych połączonych z półmetalicznymi ferromagnetykami. Zaproponowałem również sposób w jaki technika równań ruchu dla fukcji Greena pozwala na kompensowanie efektu Kondo w kropkach kwantowych z ferromagnetycznymi elektrodami. Badałem także kropki kwantowe sprzężone z nadprzewodnikami pod katem współzawodnictwa pomiędzy efektem Kondo a odbiciami Andreeva oraz ich przejawem w wielkościach termoelektrycznych.

Zagadnienia te były dyskutowane w pracach [B-19, B-23, B-26].

Zdobyte przeze mnie doświadczenie oraz umiejętność spojrzenia na dany problem fizyczny od strony teoretycznej i eksperymentalnej motywują mnie do dalszych badań i do rozwijania tematyki związanej z układami niskowymiarowymi.

Lublin, 31 stycznia 2012 r.

Montuse Knewlee

III. Osiągnięcia będące podstawą o ubieganie się o stopień doktora habilitowanego

Jako osiągnięcie, wynikające 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.), wskazuję cykl jedenastu jednotematyczych prac [A-01 - A-11] zatytułowany *Struktury jednowymiarowe na powierzchniach krzemu*.

1. Prace będące podstawą o ubieganie się o stopień doktora habilitowanego

W nawiasach podane zostały:

- impact factor (zgodnie z rokiem opublikowania)
 Pracom opublikowanym w latach 2011-2012 przypisany został impact factor za rok 2010.
- liczba cytowań według bazy Web of Science.
- A-01. 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 (2005), (0.836; 19).
- A-02. M. Krawiec, T. Kwapiński, M. Jałochowski, Double nonequivalent chain structure on a vicinal Si(557)-Au surface, Phys. Rev. B 73, 075415 (2006), (3.107; 28).
- A-03. M. Krawiec, First principles study of Si(335)-Au surface, Appl. Surf. Sci. 254, 4318 (2008), (1.576; 4).
- A-04. M. Krawiec, Pb chains on reconstructed Si(335) surface, Phys. Rev. B 79, 155438 (2009), (3.475; 6).
- A-05. A. Stępniak, P. Nita, M. Krawiec, M. Jałochowski, In and Si adatoms on Si(111)5×2-Au: Scanning tunneling microscopy and first-principles density functional calculations, Phys. Rev. B 80, 125430 (2009), (3.475; 2).
- A-06. M. Krawiec, Structural model of the Au-induced Si(553) surface: Double Au rows, Phys. Rev. B 81, 115436 (2010), (3.774; 6).

- A-07. M. Krawiec, M. Jałochowski, Array of double Au-Ag chains on the Si(557) surface, Appl. Surf. Sci. 256, 4813 (2010), (1.795; 1).
- A-08. M. Krawiec, M. Jałochowski, *Doping of the step-edge Si chain: Ag on a Si(557)* surface, Phys. Rev. B 82, 195443 (2010), (3.774; 2).
- A-09. P. Nita, M. Jałochowski, M. Krawiec, A. Stępniak, One-dimensional diffusion of Pb atoms on the Si(553)-Au surface, Phys. Rev. Lett. 107, 026101 (2011), (7.622; 1).
- A-10. P. Nita, G. Zawadzki, M. Krawiec, M. Jałochowski, Structural and electronic properties of double Pb chains on the Si(553)-Au surface, Phys. Rev. B 84, 085453 (2011), (3.774; 0).
- A-11. A. Stępniak, M. Krawiec, G. Zawadzki, M. Jałochowski, *Electronic stabilization of the Si(111)5×2-Au surface: Pb and Si adatoms*, J. Phys.: Condens. Matter 24, 095002 (2012), (2.332; 0).

2. Najważniejsze wyniki prac będących podstawą o ubieganie się o stopień doktora habilitowanego

Cykl prac [A-01 - A-11], zatytułowany *Struktury jednowymiarowe na powierzchniach krzemu* poświęcony jest wybranym strukturom jednowymiarowym (1D) wytworzonym na powierzchni Si(111) oraz na powierzchniach wicynalnych Si(hhk).

W pracach tych przedstawione zostały rezultaty badań eksperymentalnych i teoretycznych dotyczących zarówno budowy atomowej jak i właściwości elektronowych wybranych powierzchni Si oraz struktur na nich wytworzonych. Szczególny nacisk został położony na powierzchnie Si wytworzone w procesie samoorganizowania się atomów złota w struktury jednowymiarowe oraz na możliwość wykorzystania tych układów jako matryce do tworzenia łańcuchów złożonych z atomów innych pierwiastków, często charakteryzujących się zupełnie innymi właściwościami elektronowymi. Badania eksperymentalne zostały przeprowadzone przy użyciu skaningowej mikroskopii i spektroskopii tunelowej (STM i STS) oraz spektroskopii fotoelektronów z rozdzielczościa katowa (ARPES). Natomiast obliczenia teoretyczne wykonane były przy pomocy dwóch różnych podejść. Prad tunelowy pomiędzy ostrzem STM a powierzchnia liczony był w modelu ciasnego wiazania metodą równań ruchu dla nierównowagowych funkcji Greena. Stuktura atomowa i elektronowa badanych układów została określona z pierwszych zasad w ramach teorii funkcjonału gestości (DFT). Podejście DFT było również wykorzystane w badaniach nad energetyka powierzchni i struktur na nich wytworzonych oraz do otrzymania topografii STM powierzchni.

A-01. 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 (2005).

Praca poświęcona jest badaniom STM powierzchni Si(335) indukowanej atomami Au. Celem pracy była charakterystyka topograficzna tej powierzchni dla różnych napięć tunelowania pomiędzy ostrzem STM a powierzchnią. Poznanie właściwości powierzchni Si(335)-Au jest zagadniem interesującym samym w sobie z powodu jej przybliżonego jednowymiarowego charakteru. Jest ono także istotne ze względu na możliwość wykorzystania tej powierzchni do wytwarzania na niej innych struktur 1D. Otrzymane wyniki STM pokazały obecność regularnie rozłożonych łańcuchów atomowych o długości od kilku do kilkunastu Å. Uzyskana rodzielczość atomowa STM dostarczyła kilku ważnych informacji na temat szczegółów budowy i właściwości elektronowych obserwowanych struktur 1D. Zmierzony okres modulacji topografii STM wzdłuż łańcuchów jest równy $2 \times a_{[1\bar{1}0]} = 7.68$ Å, gdzie $a_{[1\bar{1}0]}$ jest odległością pomiędzy atomami Si w kierunku $[1\bar{1}0]$ (równoległym do krawędzi tarasów). Dwa razy większy okres od wartości wynikającej z odległości atomów w kierunku $[1\bar{1}0]$ wskazuje na istotne znaczenie efektów elektronowych w układzie. Poza tym, po raz pierwszy zaobserwowano w tych układach odwrócenie topografii STM

przy zmianie polaryzacji napięcia tunelowania, co było dodatkowym argumentem przemawiającym za istotą efektów elektronowych. Aby zinterpretować powyższe wyniki pomiarów, przeprowadzono obliczenia teoretyczne prądu tunelowego metodą nierównowagowych funkcji Greena w ramach modelu ciasnego wiązania w układzie złożonym z ostrza STM i pojedynczego łańcucha umieszczonego na jednorodnej powierzchni. Wyniki tych obliczeń potwierdziły przypuszczenia. Aby uzyskać odwrócenie topografii STM i modulację $2 \times a_{[1\bar{1}0]}$, gęstość stanów łańcucha, a co za tym idzie współczynnik transmisji układu, musi być asymetryczną funkcją energii względem poziomu Fermiego.

A-02. M. Krawiec, T. Kwapiński, M. Jałochowski, Double nonequivalent chain structure on a vicinal Si(557)-Au surface, Phys. Rev. B 73, 075415 (2006).

Głównym celem pracy była charakterystyka powierzchni Si(557)-Au pod kątem topografii STM zależnej od napięcia tunelowania. Podobnie jak w przypadku Si(335)-Au, powierzchnia ta może służyć jako układ, w którym w przybliżony sposób realizuje się fizyka 1D. Można ją także wykorzystać do wytwarzania na niej regularnych matryc struktur 1D. Uzyskane wyniki pomiarów STM pokazały, że powierzchnia ta pokryta jest tablica struktur 1D w postaci podwójnych łańcuchów (C i D) na każdym tarasie. Łańcuchy mają długość do kilkudziesięciu A i rozdzielone sa defektami. Dodatkowo na łańcuchach występuja jasne obiekty [bright protrusions (BP)], zidentyfikowane jako adatomy Si. Lańcuchy obserwowane w obrębie jednego tarasu mają różne właściwości. Łańcuch C charakteryzuje się niewielka amplituda zmian wysokości i wykazuje odwrócenie obrazu topograficznego przy zmianie polaryzacji napięcia tunelowania, a łańcuch D - dużą aplitudą zmian wysokości i brakiem odwrócenia topografii. Poza tym łańcuch C jest lepiej widoczny przy napięciu ujemnym, a D - przy dodatnim. Zmierzony okres modulacji topografii STM wzdłuż łańcuchów C i D jest taki sam i wynosi, podobnie jak w przypadku powierzchni Si(335)-Au, $2 \times a_{[1\bar{1}0]}$. Przeprowadzone obliczenia teoretyczne prądu tunelowania metodą nierównowagowych funkcji Greena w podobnym modelu, jak dla powierzchni Si(335)-Au, ale uwzględniające fakt istnienia dwóch różnych łańcuchów, również wskazywały na znacząca role efektów elektronowych w tunelowaniu pomiędzy ostrzem STM a powierzchnią. Otrzymane wyniki obliczeń pradu tunelowego wyjaśniały obserwowane zmiany topografii STM (lub ich brak) w zależności od parametrów modelu, głównie od wartości energii poziomów jednocząstkowych atomów tworzących dany łańcuch. Doprowadziło to do konkluzji, że jeden z łańcuchów jest utworzony z atomów Au (łańcuch D), a drugi z atomów Si (łańcuch C). W zmierzonej topografii STM zaobserwowano także występowanie zero-wymiarowych (0D) stanów końcowych, które charkteryzują się funkcją falową zlokalizowana na końcach łańcucha i zanikają eksponencjalnie w kierunku środka łańcucha. Wcześniej stany końcowe 0D były obserwowane tylko w przypadku powierzchni Si(553)-Au.

A-03. M. Krawiec, First principles study of Si(335)-Au surface, Appl. Surf. Sci. 254, 4318 (2008).

W pracy po raz pierwszy przedstawiono i przedyskutowano wyniki obliczeń DFT właściowści atomowych i elektronowych powierzchni Si(335)-Au. Celem pracy była weryfikacja, w oparciu o obliczenia z pierwszych zasad, istniejącej w literaturze propozycji modelu strukturalnego tej powierzchni. Poprawny model strukturalny pozwalał na głębsze poznanie właściwości powierzchni Si(335)-Au oraz mógł być wykorzystany do badań innych struktur wytworzonych na tej powierzchni. Otrzymany model strukturalny charakteryzuje się istnieniem pojedynczych łańcuchów Au, wbudowanych w tarasy powierzchni Si(335) oraz łańcuchów typu plastra miodu [honeycomb chains (HC)] na brzegach tarasów. Atomy Si na brzegach tarasów, będące częścią struktury HC odpowiedzialne są za obserwowane w STM łańcuchy monoatomowe. Obliczona struktura pasmowa powierzchni Si(335)-Au dla tego modelu ma charakter metaliczny i w zadowalający sposób odzwierciedla wyniki pomiarów ARPES. W szczególności dwa pasma energetyczne widoczne w ARPES pochodzą od hybrydyzacji łańucha Au z sąsiadującymi atomami Si oraz od niewysyconych wiązań atomów Si na brzegu tarasu.

A-04. M. Krawiec, *Pb chains on reconstructed Si(335) surface*, Phys. Rev. B **79**, 155438 (2009).

Praca przedstawia wyniki obliczeń DFT właściwości strukturalnych i elektronowych monoatomowych łańcuchów Pb na powierzchni Si(335)-Au. Celem tych badań było zaproponowanie poprawnego modelu strukturalnego, który opisywałby i wyjaśniał wyniki pomiarów STM topografii powierzchni Si(335)-Au/Pb i pomiarów ARPES struktury pasmowej. Wyniki obliczeń DFT pokazują, że atomy Pb adsorbują na środku tarasów i wiążąc się z łańcuchem Au, tworzą struktury 1D. W rezultacie tego, w STM obserwuje się dwie rożne struktury 1D na każdym z tarasów. Są to łańcuchy Pb oraz atomy Si na krawedziach tarasów, co zostało potwierdzone w symulacjach STM w ramach podejścia Tersoffa-Hamanna. Dość duży zysk energetyczny związany z adsorpcją atomów Pb znajduje odzwierciedlenie w reorganizacji atomów Si w warstwie powierzchniowej. W szczególności, ulega zniszczeniu łańcuch HC, występujący w przypadku czystej powierzchni Si(335)-Au. Po raz pierwszy pokazano również, że na tej powierzchni ma miejsce pofałdowanie brzegów tarasów, spowodowane pojawieniem się periodycznej dystorsji sieci [periodic lattice distortion (PLD)] w łańcuchu Si na brzegu tarasu w kierunku prostopadłym do powierzchni. Wcześniej zasugerowano istnienie tego efektu tylko w przypadku powierzchni Si(557)-Au. Obliczona struktura pasmowa posiada charakter metaliczny i zadowalający sposób odtwarza wyniki pomiarów ARPES. W szczególności, dobrze widoczne w widmach fotoemisyjnych pasma 1D pochodzą od hybrydyzacji pomiędzy atomami Au i Si, charakterystycznej dla czystej powierzchni Si(335)-Au, oraz od zaadsorbowanego łańcucha Pb.

A-05. A. Stępniak, P. Nita, M. Krawiec, M. Jałochowski, In and Si adatoms on Si(111)5×2-Au: Scanning tunneling microscopy and first-principles density functional calculations, Phys. Rev. B 80, 125430 (2009).

Celem badań opisanych w tej pracy była próba wytworzenia uporządkowanej supersieci adatomów z okresowościa 5×4 na powierzchni Si(111) 5×2 -Au. Czysta powierzchnia Si $(111)5 \times 2$ -Au charakteryzuje się obecnością adatomów Si, tworzących supersieć 5×4 , ale tylko połowa dozwolonych miejsc jest zapełniona przez adatomy Si. Dlatego wydawało się intersujące aby zapełnić wolne miejsca adsorpcyjne atomami innego pierwiastka, w tym przypadku indu. Wyniki pomiarów topografii STM powierzchni Si $(111)5 \times 2$ -Au z zadsorbowanymi atomami In w ilości 1 atom In na komórkę 5×8 , pokazały istnienie bardziej regularnej supersieci 5×4 . Dodatkowo okazało się, że niektóre adatomy są niewidoczne w topografii STM stanów obsadzonych. Aby wyjaśnić takie zachowanie, przeprowadzono pomiary STS struktury elektronowej oraz obliczenia DFT zarówno struktury atomowej jak i elektronowej. Otrzymane wyniki sugeruja istenienie trzech rodzajów struktur: adatomów Si, adatomów In ulokowanych w wolnych pozycjach adatomów Si oraz związanych par Si-In. Te ostatnie są niewidoczne w topografii STM przy napięciach ujemnych, a przy dodatnich obserwuje się niewielkie przesunięcia w ich położeniach względem adatomów Si czy In. Adsorpcja atomów In nie doprowadziła jednak do utworzenia perfekcyjnie uporządkowanej supersieci 5×4 adatomów. Nadal pozostaje ok. 25 % nieobsadzonych miejsc adsorpcyjnych.

A-06. M. Krawiec, Structural model of the Au-induced Si(553) surface: Double Au rows, Phys. Rev. B 81, 115436 (2010).

Celem tej pracy było określenie modelu strukturalnego powierzchni Si(553) z podwójnymi łańcuchami Au na podstawie obliczeń DFT. Początkowo przyjmowana ilość złota, która porządkuje tę powierzchnię była dwukrotnie zaniżona. Pokrycie Au wystarczało do utworzenia pojedynczego łańcucha atomów Au na każdym z tarasów. Dlatego wszystkie wcześniejsze próby opracowania modelu strukturalnego zakończyły się niepowodzeniem. Dopiero uwzględnienie istnienia dwóch łańcuchów Au na tarasie pozwoliło uzyskać poprawny model strukturalny. Model ten charakteryzuje się istnieniem podwójnego zdimeryzowanego łańcucha Au wbudowanego w powierzchnie tarasu oraz obecnościa łańcucha HC na brzegu tarasu. Inaczej, niż w przypadku Si(335)-Au i Si(557)-Au, atomy Si na brzegu tarasu nie wykazują zjawiska pofałdowania. Przeprowadzone symulacje topografii STM w trybie stałego pradu w podejściu Tersoffa-Hamanna doskonale zgadzaja się z wynikami eksperymentalnymi. W szczególności, widoczny w STM łańcuch atomowy tworzą atomy Si na brzegu tarasu, należące do struktury HC. Natomiast obserwowana na tarasach modulacja topografii STM z okresowościa $\times 2$ pochodzi od zdimeryzowanych atomów Au. Warto zaznaczyć, że czasami obserwuje się w STM modulację $\times 1$ na tarasach, która w naturalny sposób pojawia się w wysokotemperaturowym odpowiedniku tego modelu, w którym brak jest dimeryzacji atomów Au. Podwójne łańcuchy Au odpowiedzialne są za istenienie dwóch pasm energetycznych, obserwo-

wanych w doświadczeniach ARPES, przy czym jedno z pasm jest rozszczepione ze względu na oddziaływanie spin-orbita. Poprawność zaproponowanego modelu została później potwierdzona w doświadczeniu z wykorzystaniem dyfrakcji promieni X, a także przez niezależne obliczenia DFT.

A-07. M. Krawiec, M. Jałochowski, Array of double Au-Ag chains on the Si(557) surface, Appl. Surf. Sci. 256, 4813 (2010).

W pracy zaprezentowane zostały wyniki badań strukturalnych z wykorzystaniem STM powierzchni Si(557)-Au pokrytej srebrem. Celem tych badań było uzyskanie odpowiedzi na pytanie, czy w procesie samoorgnizowania się atomów Ag moga powstać struktury 1D. Problem ten przebadano pod katem pokrycia Ag oraz temperatury wygrzewania. Przy pokryciach powyżej 1 ML Ag obserwuje się wydłużone wyspy, a przy niższych pokryciach pojawiają się struktury 1D. Bardzo istotny pływ na morfologie powierzchni ma temperatura wygrzewania. W przypadku pokryć rzędu 1 ML, morfologia nie zmienia się aż do temperatury ok. 600 K. W temperaturach wyższych niż 700 K, tworzą się ściany (111) o szerokości ok. 4 nm. Natomiast regularne monoatomowe łańcuchy Ag obserwuje się przy pokryciu 0.25 ML. Topografia STM bardzo przypomina powierzchnię Si(557)-Au. Również widoczne są dwa rodzaje łańcuchów (C i D), co sugeruje, że atomy Ag nieznacznie tylko modyfikuja powierzchnię. Inaczej niż w przypadku powierzchni Si(557)-Au, obserwuje się w STM tylko jeden łańcuch przy danej polaryzacji napięcia tunelowania: łańcuch C przy ujemnej i łańcuch D przy dodatniej. Jednak dokładniejsza analiza topografii STM uwidacznia, że przy ujemnej polaryzacji słabo widoczny jest także łańcuch D. W topografii stanów nieobsadzonych obserwuje się łańcuch D oraz strukture typu zygzak w miejscu łańcucha C. Takie zachowanie topografii STM wytłumaczone zostało adsorpcja atomów Ag na krawędziach tarasów i istnieniem silnych efektów elektronowych w tym układzie.

A-08. M. Krawiec, M. Jałochowski, *Doping of the step-edge Si chain: Ag on a Si(557)* surface, Phys. Rev. B 82, 195443 (2010).

Praca poświęcona jest domieszkowaniu elektronowemu struktur jednowymiarowych. Na przykładzie powierzchni Si(557)-Au pokazano, jak adsoprcja atomów Ag wpływa na strukturę elektronową powierzchni. Przeprowadzone obliczenia DFT dla tej powierzchni, pokrytej 0.25 ML Ag pokazują, że istnieją dwa nierównoważne miejsca adsorpcyjne atomów Ag w obrębie jednej komórki elementarnej. Jedno z nich znajduje się na brzegu tarasu, a drugie pomiędzy łańcuchem Au i strukturą HC. Przeprowadzone obliczenia topografii STM w podejściu Tersoffa-Hamanna doskonale zgadzają się z wynikami pomiarów STM. To co obserwuje się przy polaryzacji dodatniej, to są adatomy Si tworzące łańcuch D oraz zygzakowatą strukturę, złożoną z atomów Ag na krawędzi tarasów oraz części atomów Si wchodzących w skład łańcucha HC. Natomiast przy polaryzacji ujemnej dobrze widoczny jest łańcuch C i nieco słabiej łańcuch D. Pomimo, że atomy Ag nieznacznie tylko modyfikują strukturę powierzchniową, obecność ich odgrywa dużą rolę we właściwościach

elektronowych. Prowadzą one do przesunięć struktury elektronowej powierzchni. Różne wartości tych przesunięć dla poszczególnych atomów wskazują na lokalne domieszkowanie elektronowe powierzchni. Największe przesunięcie widma elektronowego obserwuje się dla atomów Si na krawędzi tarasu, znajdujących się w dolnych położeniach (związanych z występowaniem zjawiska pofałdowania). Efekty te przejawiają się także w teoretycznej strukturze pasmowej. Adsorpcja Ag nie prowadzi do pojawienia się nowych stanów energetycznych w otoczeniu poziomu Fermiego, a jedynie do przesunięcia istniejących pasm, charakterystycznych dla czystej powierzchni Si(557)-Au. Powoduje również pojawienie się przerwy energetycznej o wartości ok. 150 meV. Wszystko to sugeruje, że atomy Ag działają jak domieszki, dostarczając elektrony strukturom powierzchniowym i prowadzą do przejścia metalizolator. Praca ta jest pierwszym przykładem w literaturze dotyczącym domieszkowania elektronowego układów jednowymiarowych i otwiera drogę do modyfikowania w sposób kontrolowany właściwości elektronowych w jednym wymiarze.

A-09. P. Nita, M. Jałochowski, M. Krawiec, A. Stępniak, One-dimensional diffusion of Pb atoms on the Si(553)-Au surface, Phys. Rev. Lett. 107, 026101 (2011).

W pracy omówione zostało zjawisko jednowymiarowej dyfuzji na przykładzie atomów Pb na powierzchni Si(553)-Au. Przeprowadzone pomiary STM pokazały, że dyfuzja pojedvnczych atomów Pb na Si(553)-Au odbywa się wzdłuż krawędzi tarasów na dystansie ograniczonym przez defekty. Nie obserwuje się natomiast żadnej dyfuzji w kierunku prostopadłym. Dokonując pomiarów STM z różnymi prędkościami skanowania, określono częstość przeskoków atomów Pb. Natomiast przeprowadzone obliczenia DFT mapy adsorpcji atomów Pb na tej powierzchni oraz barier dyfuzyjnych pozwoliły wytłumaczyć wyniki eksperymentu. Z obliczeń DFT wynikało, że na brzegach tarasów tworzą się jednowymiarowe kanały dyfuzyjne dla atomów Pb, ograniczone w kierunku prostopadłym przez bariery potencjału ponad 1 eV. W jednowymiarowych kanałach atomy Pb napotykają znacznie mniejsze bariery: 0.18, 0.37 i 0.42 eV. Z powyższych danych, zmierzonej częstości przeskoków atomów Pb oraz obliczonej maksymalnej bariery dyfuzyjnej w kanałach 1D, wyznaczono również czynnik przedwykładniczy w równaniu Arrheniusa. Ograniczenie ruchu atomów do jednego wymiaru pozwoli na głębsze poznanie zjawiska dyfyzji oraz na badanie samoorganizowania się atomów w kontrolowany sposób.

A-10. P. Nita, G. Zawadzki, M. Krawiec, M. Jałochowski, Structural and electronic properties of double Pb chains on the Si(553)-Au surface, Phys. Rev. B 84, 085453 (2011).

Głównym celem pracy było pokazanie możliwości wytwarzania złożonych struktur 1D na przykładzie atomów Pb na powierzchni Si(553)-Au oraz charakterystyka ich właściwości strukturalnych i elektronowych. W przypadku pokrycia Pb równym 0.35 ML obserwuje się podwójne łańcuchy Pb na każdym z tarasów. Zmierzony okres modulacji topografii STM tych łańcuchów jest taki sam i wynosi $2 \times a_{[1\bar{1}0]}$,

jednak łańcuchy te mają różne właściwości. Jeden z łańcuchów Pb (C2) wykazuje odwrócenie obrazu topograficznego przy zmianie polaryzacji napięcia tunelowania, a drugi (C1) nie. Aby wyjaśnić to zjawisko, przeprowadzono obliczenia DFT struktury powierzchni i otrzymano sześć modeli strukturalnych o zbliżonych energiach powierzchniowych. Wszystkie te modele różnią się między sobą tylko położeniem atomów Pb w łańcuchu C1, natomiast aranżacja atomów Pb w łańcuchu C2 jest niemal identyczna we wszystkich przypadkach. Wyniki obliczeń DFT sugerują, że łańcuch C1 znajduje sie na brzegu tarasu, a łańcuch C2 - na środku, a za odwrócenie topografii STM w łańcuchu C2 odpowiedzialna jest dimeryzacja atomów Au. W widmach fotoemisyjnych wyraźnie widoczne są dwa pasma przecinające poziom Fermiego, charakterystyczne dla powierzchni Si(553)-Au. Dodatkowo obserwuje się pasmo pochodzące od atomów Pb w łańcuchu C2, którego kształt przypomina strukturę związaną z atomami Pb na Si(335)-Au. Teoretyczna strukturą pasmową, uzyskana przy pomocy DFT, odtwarza kształt tych pasm dla energii niższych od -0.2 eV. Powyżej tej energii obserwuje się przerwę energetyczna rzędu 0.3 eV. Podobnie jak w przypadku Si(557)-Au/Ag obserwuje się także przesunięcie struktury pasmowej. Związane jest to z transferem ładunku od atomów Pb do powierzchni. Otrzymane wyniki pokazuja, że obecność atomów Pb na powierzchni Si(553)-Au znacznie modyfikuje właściwości zarówno strukturalne jak i elektronowe, a sama powierzchnia Si(553)-Au może służyć jako podłoże do wytwarzania bardziej skomplikowanych struktur jednowymiarowych.

A-11. A. Stępniak, M. Krawiec, G. Zawadzki, M. Jałochowski, *Electronic stabilization of the Si(111)5×2-Au surface: Pb and Si adatoms*, J. Phys.: Condens. Matter 24, 095002 (2012).

W pracy zaprezentowane zostały wyniki badań STM, STS, ARPES i obliczeń DFT właściwości powierzchni Si(111)5×2-Au pokrytej niewielka ilościa ołowiu. Celem tej pracy było wykazanie, że powierzchnia $Si(111)5\times 2$ -Au jest stabilizowana elektronowo. Ołów wybrany był ze względu na taką samą liczbę elektronów walencyjnych jak krzem. W zmierzonej topografii STM tej powierzchni pokrytej atomami Pb w ilości jeden atom Pb na komórke 5×8 zaobserwowano niemal perfekcyjne ułożenie adatomów w supersieć 5×4, podobnie jak w przypadku adsorpcji dodatkowych atomów Si. Inaczej niż w przypadku atomów In na Si $(111)5\times 2$ -Au, zarówno adatomy Si jak i Pb widoczne są przy obydwu polaryzacjach napięcia tunelowania, chociaż dla napieć dodatnich adatomy Si charakteryzyją się mniejszą intensywnością sygnału STM. Przeprowadzone obliczenia DFT pokazują, że atomy Pb adsorbują tylko w (wolnych) miejscach adatomów Si, co związane jest z taką samą liczbą elektronów walencyjnych atomów Pb jak i atomów Si. Jest to więc argument świadczący o elektronowej naturze stabilizacji powierzchni $Si(111)5 \times 2$ -Au. Dodatkowego argumentu dostarcza zmierzona i obliczona struktura elektronowa. Okazuje się, że pod wpływem adsorpcji atomów Pb, kształt pasm elektronowych praktycznie nie zmienia się, a jedynie przesuwa się cała struktura elektronowa w stronę niższych energii. Porówanie widm ARPES wraz z obliczoną strukturą pasmową dla powierzchni do-

mieszkowanej elektronowo potwierdza sztywne przesunięcie pasm, którego wartość jest porównywalna do wartości zmierzonej w przypadku powierzchni Si(111)5×2-Au pokrytej dodatkowymi adatomami Si. Potwierdza to, że zarówno adatomy Pb jak i Si prowadzą do identycznych właściwości elektronowych powierzchni, a więc powierzchnia Si(111)5×2-Au jest stabilizowana elektronowo. Praca ta wskazuje również na możliwość wytwarzania nanostruktur z kontrolowalnymi właściwościami.

Lublin, 31 stycznia 2012 r.

Montusc Knewler

3. Oświadczenia dotyczące współautorstwa prac

- 1. Prof. dr hab. Mieczysław Jałochowski, [A-01, A-02, A-05, A-07 A-11].
- 2. Dr Tomasz Kwapiński, [A-01, A-02].
- 3. Dr Paweł Nita, [A-05, A-09, A-10].
- 4. Dr Agnieszka Stępniak, [A-05, A-09, A-11].
- 5. Mgr Grzegorz Zawadzki, [A-10, A-11].

WK

Prof. dr hab. Mieczysław Jałochowski

Lublin, 25.01.2012

Oświadczenie współautora

Jako współautor publikacji wykonywanych w Zakładzie Fizyki Powierzchni i Nanostruktur Instytutu Fizyki UMCS, wykorzystanych przez dra Mariusza Krawca w habilitacji oświadczam, że powstały one przy Jego dominującym udziale.

1. W badaniach opisanych w publikacji:

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 (2005),

przygotowałem wicynalne podłoże krzemu, przekazałem wiedzę o technologii wytwarzania atomowych łańcuchów Au na tarasach próbki, brałem udział w dyskusjach podczas interpretacji wyników pomiarów i formułowaniu wniosków. Szacowany udział 10%.

2. W badaniach opisanych w publikacji:

M. Krawiec, T. Kwapiński, M. Jałochowski, *Double nonequivalent chain structure on a vicinal Si(557)-Au surface*, Phys. Rev. **B 73**, 075415 (2006),

przygotowałem wicynalne podłoże krzemu, przekazałem wiedzę o technologii wytwarzania atomowych łańcuchów Au na tarasach próbki, brałem udział w dyskusjach podczas interpretacji wyników pomiarów i formułowaniu wniosków. Szacowany udział 10%.

3. W badaniach opisanych w publikacji:

A. Stępniak, P. Nita, M. Krawiec, M. Jałochowski, *In and Si adatoms on Si(111)5×2-Au: Scanning tunneling microscopy and first-principles density functional calculations*, Phys. Rev. **B 80**, 125430 (2009),

przekazałem informacje o technologii wytwarzania nadstruktury $Si(111)5 \times 2$ -Au, przygotowałem programy numeryczne do obliczeń normalizowanych pochodnych charakterystyk prądowo-napięciowych tunelowania, brałem udział w dyskusjach podczas interpretacji wyników pomiarów i formułowaniu wniosków. Szacowany udział 15%.

4. W badaniach opisanych w publikacji:

M. Krawiec, M. Jałochowski, Array of double Au-Ag chains on the Si(557) surface, Appl. Surf. Sci. 256, 4813 (2010),

wykonałem pomiary topograficzne i spektroskopowe mikroskopem tunelowym, brałem udział w dyskusjach podczas interpretacji wyników pomiarów i formułowaniu wniosków. Szacowany udział 20%.

5. W badaniach opisanych w publikacji:

M. Krawiec, M. Jałochowski, *Doping of the step-edge Si chain: Ag on a Si(557)surface*, Phys. Rev. **B 82**, 195443 (2010),

wykonałem pomiary topograficzne i spektroskopowe mikroskopem tunelowym, brałem udział w dyskusjach podczas interpretacji wyników pomiarów i formułowaniu wniosków. Szacowany udział 20%.

6. W badaniach opisanych w publikacji:

P. Nita, M. Jałochowski, M. Krawiec, A. Stępniak, One-dimensional diffusion of Pb atoms on the Si(553)-Au surface, Phys. Rev. Lett. 107, 026101 (2011),

opracowałem wyniki pomiarów mikroskopem tunelowym, brałem udział w dyskusjach podczas interpretacji wyników pomiarów i formułowaniu wniosków, redagowałem manuskrypt. Szacowany udział 25%.

7. W badaniach opisanych w publikacji:

P. Nita, G. Zawadzki, M. Krawiec, M. Jałochowski, *Structural and electronic properties of double Pb chains on the Si(553)-Au surface*, Phys. Rev. **B 84**, 085453 (2011), przygotowałem część wyników pomiarów, brałem udział w dyskusjach podczas interpretacji wyników pomiarów i formułowaniu wniosków. Szacowany udział 15%.

8. W badaniach opisanych w publikacji:

A. Stępniak, M. Krawiec, G. Zawadzki, M. Jałochowski, *Electronic stabilization of the* $Si(111)5 \times 2$ -Au surface: Pb and Si adatoms, J. Phys.:Condens. Matter, **24**, 095002 (2012), brałem udział w dyskusjach podczas interpretacji wyników pomiarów i formułowaniu wniosków. Szacowany udział 10%.

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej

Instytut Fizyki

Zakład Fizyki Powierzchni i Nanostruktur

Dr Tomasz Kwapiński

Oświadczenie współautora

Jako współautor publikacji wykorzystywanych przez dra Mariusza Krawca w Jego przewodzie habilitacyjnym oświadczam, że:

 w badaniach opisanych w publikacji: M. Krawiec, T. Kwapiński and M. Jałochowski, "Scanning tunneling microscopy of monoatomic gold chains on vicinal Si(335) surface: experimental and theoretical study" Phys. Stat. Sol. B, **242**, 332 (2005) przeprowadziłem analityczne obliczenia prądu tunelowego oraz konduktancji, brałem udział w interpretacji wyników, formułowaniu wniosków oraz współredagowałem manuskrypt w/w publikacji. Szacowany udział:15%

w badaniach opisanych w publikacji:
 M. Krawiec, T. Kwapiński and M. Jałochowski, "Double nonequivalent chain structure on a vicinal Si(557)-Au surface"
 Phys. Rev. B 73, 075415 (2006)
 przeprowadziłem analityczne obliczenia prądu tunelowego oraz konduktancji, brałem udział w interpretacji wyników oraz współredagowałem manuskrypt w/w publikacji. Szacowany udział: 15%

T. Kuspill

Oświadczenie współautora

Jako współautor publikacji zrobionych w Zakładzie Fizyki Powierzchni i Nanostruktur Instytutu Fizyki UMCS i użytych przez dr Mariusza Krawca w jego habilitacji, oświadczam że powstały one przy Jego dominującym udziale

1.W badaniach opisanych w publikacji: PRB 80, 125430 (2009) brałem udział w dyskusjach podczas interpretacji wyników pomiarów i formułowania wniosków. Szacowany udział: 5%

2. W badaniach opisanych w publikacji: PRL 107, 026101 (2011) wytworzyłem nadstrukturę złota na powierzchni Si(553), opracowałam technologię osadzania pojedynczych atomów Pb, wykonałem pomiary STM/STS. Szacowany udział: 20%

3. W badaniach opisanych w publikacji: PRB 84, 085453 (2011) wytworzyłam nadstrukturę złota na powierzchni Si(553), wytworzyłem podwójne łańcuchy Pb na tym podłożu, wykonałem pomiary STM/STS. Szacowany udział: 20%

Parrot Nito

Oświadczenie współautora

Jako współautor publikacji wykonanych w Zakładzie Fizyki Powierzchni i Nanostruktur w Instytucie Fizyki UMCS, wykorzystanych przez dra Mariusza Krawca w Jego habilitacji oświadczam, że powstały one przy Jego dominującym udziale.

1. W badaniach opisanych w publikacji:

A. Stępniak, P. Nita, M. Krawiec, M. Jałochowski, In and Si adatoms on Si(111)5×2-Au: Scanning tunneling microscopy and first-principles density functional calculations. Physical Review B **80**, 125430 (2009),

wytworzyłam nadstrukturę 5×2 złota na płaskiej powierzchni Si(111), wykonałam pomiary metodą skaningowej mikroskopii i spektroskopii tunelowej (STM/STS). Szacowany udział: 20%

2. W badaniach opisanych w publikacji:

P. Nita, M. Jałochowski, M. Krawiec, A. Stępniak, One-dimensional diffusion of Pb atoms on the Si(553)-Au surface, Physical Review Letters **107**, 026101 (2011),

brałam udział w dyskusjach podczas interpretacji wyników pomiarów. Szacowany udział: 5%

3. W badaniach opisanych w publikacji:

A. Stępniak, M. Krawiec, G. Zawadzki, M. Jałochowski, *Electronic stabilization of the* $Si(111)5 \times 2$ -Au surface: Pb and Si adatoms, Journal of Physics: Condensed Matter 24, 095002 (2012),

wytworzyłam nadstrukturę 5×2-Au, wykonałam pomiary metodą skaningowej mikroskopii i spektroskopii tunelowej (STM/STS). Szacowany udział: 20%

Agniezka Stępniak

Oświadczenie współautora

Jako współautor publikacji wykonanych w Zakładzie Fizyki Powierzchni i Nanostruktur w Instytucie Fizyki UMCS, wykorzystanych przez dra Mariusza Krawca w Jego habilitacji oświadczam, że powstały one przy Jego dominującym udziale.

1. W badaniach opisanych w publikacji:

P. Nita, G. Zawadzki, M. Krawiec, M. Jałochowski, *Structural and electronic properties* of double Pb chains on the Si(553)-Au surface, Physical Review B **84**, 085453 (2011), wykonałem pomiary kątowo rozdzielczej fotoemisji ARPES z powierzchni Si(553)-Au/Pb. Szacowany udział: 10%

2. W badaniach opisanych w publikacji:

A. Stępniak, M. Krawiec, G. Zawadzki, M. Jałochowski, *Electronic stabilization of the Si(111)5×2-Au surface: Pb and Si adatoms*, Journal of Physics: Condensed Matter, **24**, 095002, wykonałem pomiary kątowo rozdzielczej fotoemisji ARPES z powierzchni Si(111)-5x2-Au z adatomami Pb. Szacowany udział: 10%

Gnegon Lawadelu

IV. Pozostałe osiągnięcia naukowo-badawcze

1. Pozostałe publikacje w czasopismach wyróżnionych przez Journal Citation Reports (JCR)

W nawiasach podane zostały:

- impact factor (zgodnie z rokiem opublikowania)
- liczba cytowań według bazy Web of Science.

a) Prace opublikowane przed uzyskaniem stopnia doktora

B-01. M. Krawiec, T. Domański, K. I. Wysokiński, Do Van Hove singularities in the leads influence tunneling current through quantum dot ?, Acta Phys. Pol. A 94, 411 (1998), (0.344; 3).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 70 %.

- B-02. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, Superconductivity in correlated systems: constraint quantization of slave bosons, Phys. Rev. B 59, 9500 (1999), (3.008; 6).
 Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 70 %.
- B-03. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, Spectral functions of the quantum dot coupled to the normal and/or superconducting leads, Acta Phys. Pol. A 97, 197 (2000), (0.409; 1). Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.
- B-04. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, Charge on the quantum dot in the presence of tunneling current, Solid State Commun. 115, 141 (2000), (1.271; 12).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 70 %.

b) Prace opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora

B-05. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, Nonequilibrium Kondo effect in asymmetrically coupled quantum dot, Phys. Rev. B 66, 165408 (2002), (3.327; 28).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

B-06. M. Krawiec, B. L. Györffy, J. F. Annett, Spontaneous spin-polarized currents in superconductor-ferromagnetic metal heterostructures, Phys. Rev. B 66, 172502 (2002), (3.327; 16).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

B-07. M. Krawiec, B. L. Györffy, J. F. Annett, Andreev bound states in ferromagnetsuperconductor nanostructures, Physica C 387, 7 (2003), (1.192; 5).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

B-08. M. Krawiec, B. L. Györffy, J. F. Annett, Spin polarized current in the ground state of superconductor-ferromagnet-insulator trilayers, Europ. Phys. J. B 32, 163 (2003), (1.457; 6).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

B-09. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, Electron transport through a strongly interacting quantum dot coupled to a normal metal and BCS superconductor, Supercond. Sci. Technol. 17, 103 (2004), (1.556; 28).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

B-10. M. Krawiec, B. L. Györffy, J. F. Annett, Current carrying Andreev bound states in a superconductor-ferromagnet proximity system, Phys. Rev. B 70, 134519 (2004), (3.075; 13).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

B-11. G. Litak, M. Krawiec, 'pi-state' induced by impurities with a repulsive interaction, Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 438 (2005), (0.836; 2).

Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. W
kład własny oceniam na 30 %.

W

B-12. M. Krawiec, M. Jałochowski, M. Kisiel, High resolution scanning tunneling spectroscopy of ultrathin Pb on Si(111)-(6×6) substrate, Surf. Sci. 600, 1641 (2006), (1.880; 8).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 50 %.

B-13. M. Krawiec, T. Kwapiński, *Electron transport through a strongly correlated monoatomic chain*, Surf. Sci. **600**, 1697 (2006), (1.880; 4).

Wykonałem obliczenia analityczne. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 30 %.

B-14. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, *Thermoelectric effects in strongly interacting quantum dot coupled to ferromagnetic leads*, Phys. Rev. B **73**, 075307 (2006), (3.107; 30).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

B-15. M. Krawiec, J. F. Annett, B. L. Györffy, Spontaneous currents in a ferromagnet normal metal - superconductor trilayer, Acta Phys. Pol. A 109, 507 (2006), (0.371; 1).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

B-16. G. Litak, M. Krawiec, Superconducting pairing amplitude and local density of states in presence of repulsive centers, Physica B **378-380**, 434 (2006), (0.872; 2).

Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 30 %.

B-17. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, Thermoelectric effects in strongly interacting quantum dot coupled to ferromagnetic leads, Physica B 378-380, 933 (2006), (0.872; 6).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 70 %.

B-18. J. F. Annett, M. Krawiec, B. L. Györffy, Origin of spontaneous currents in a superconductor-ferromagnet proximity system, Physica C 437-438, 7 (2006), (0.792; 4).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

- B-19. M. Krawiec, Residual Kondo effect in quantum dot coupled to half-metallic ferromagnets, J. Phys.: Condens. Matter 18, 6923 (2006), (2.038; 1).
- B-20. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, Thermoelectric phenomena in a quantum dot asymmetrically coupled to external leads, Phys. Rev. B 75, 155330 (2007), (3.172; 17).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

B-21. A. Gorczyca, M. Krawiec, M. M. Maśka, M. Mierzejewski, Particle-hole asymmetry in the scanning tunneling spectroscopy of the high temperature superconductors, Phys. Stat. Sol. (b) 244, 2448 (2007), (1.071; 2).

Wykonałem obliczenia analityczne. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 30 %.

B-22. G. Litak, M. Krawiec, Properties of the pi state induced by impurities in a d-wave superconductor, Physica C 460, 1066 (2007), (1.079; 0).

Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 30 %.

- B-23. M. Krawiec, Compensation of the Kondo effect in quantum dots coupled to ferromagnetic leads within the equation of motion approach, J. Phys.: Condens. Matter 19, 346234 (2007), (1.886; 4).
- B-24. M. Krawiec, M. Jałochowski, Thermoelectric effects in STM tunneling through a monoatomic chain, Phys. Stat. Sol (b) 244, 2464 (2007), (1.071; 5).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

B-25. T. Kwapiński, M. Krawiec, M. Jałochowski, STM tunneling through a quantum wire with a side-attached impurity, Phys. Lett. A 372, 154 (2008), (2.174; 1).

Wykonałem obliczenia analityczne. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 30 %.

B-26. M. Krawiec, Thermoelectric transport through a quantum dot coupled to a normal metal and BCS superconductor, Acta Phys. Pol. A **114**, 115 (2008), (0.321; 1).

2. Inne publikacje

- a) Prace opublikowane przed uzyskaniem stopnia doktora
- C-01. K. I. Wysokiński, M. Krawiec, Hamiltonian slave boson approach to correlated swave superconductors, IF UMCS Annual Report (1996).
 Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Wkład własny oceniam na 50 %.
- C-02. M. Krawiec, T. Domański, K. I. Wysokiński, Modified slave boson approach to strongly correlated system: normal and superconducting state, Mol. Phys. Rep. 20, 123 (1997).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 60~%.

C-03. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, Spectral functions of 2D Hubbard model: a slave boson study, IF UMCS Annual Report (1997).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

C-04. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, *Density of states of quantum dot coupled to normal* and/or superconducting leads, IF UMCS Annual Report (1998).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

C-05. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, Single particle tunneling through quantum dot coupled to the normal and superconducting leads, IF UMCS Annual Report (1999).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 80 %.

C-06. M. Krawiec, K. I. Wysokiński, Electron transport due to the Abrokosov-Suhl resonance, Mol. Phys. Rep. 28, 64 (2000).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 70 %.

b) Prace opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora

C-07. M. Krawiec, T. Domański, G. Litak, K. I. Wysokiński, *Effects of correlations and disorder in superconductors*, Mol. Phys. Rep. **34**, 22 (2001).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne temperatury krytycznej w funkcji koncentracji nośników w podejściu bozonów pomocniczych. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 25 %.

- C-08. M. Krawiec, *Ferromagnet/superconductor heterostructures*, Psi-k Newsletter, **53**, 100 (2002).
- C-09. T. Domański, M. Krawiec, M. Michalik, K. I. Wysokiński, Transport properties of the strongly correlated systems, Condens. Matter Phys. 7, 331 (2004).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne gęstości stanów oraz przewodnictwa różniczkowego kropki kwantowej. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 25 %.

C-10. B. L. Györffy, M. Krawiec, J. F. Annett, *FFLO-like state in ferromagnet - superconductor proximity system*, rozdział w 'Physics of Spin in Solids: Materials, Methods and Applications', Ed. S. Halilov, Kluwer Academic Publishers (2004)

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Redagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 70 %.

C-11. R. Taranko, M. Krawiec, T. Kwapiński, E. Taranko, K. I. Wysokiński, Aspects of electron transport through a quantum dot, lanl.arXiv.org, cond-mat/0402493, (2004).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne wielkości spektralnych i transportowych dla kropki kwantowej w przypadku niezależnym od czasu. Brałem udział w interpretacji wyników i redagowaniu manuskryptu. Wkład własny oceniam na 30 %.

C-12. J. F. Annett, B. L. Györffy, M. Krawiec, Andreev states and spontaneous spin currents in superconductor-ferromagnet proximity systems, rozdział w 'Electron Correlation in New Materials and Nanosystems', Eds. K. Scharnberg and S. Kruchinin, Springer (2007).

Wykonałem obliczenia analityczne i numeryczne. Brałem udział w interpretacji wyników. Wkład własny oceniam na 50 %.

C-13. M. Krawiec, M. Jałochowski, *Atom za atomem*, Forum Akademickie (2007). Współredagowałem manuskrypt. Wkład własny oceniam na 50 %.

36

3. Wyjazdy i staże zagraniczne

- 1. Universiteit Antwerpen, Antwerpia, Belgia, 2000 2 dni.
- 2. University of Birstol, Bristol, Wielka Brytania, 2001-2003 29 miesięcy.
- 3. Delft University of Technology, Delft, Holandia, 2002 1 tydzień.
- 4. University of Twente, Enschede, Holandia, 2003 1 miesiąc.
- 5. Daresbury Laboratory, Warrington, Wielka Brytania, 2003 2 dni.
- 6. Universität Karlsruhe, Karlsruhe, Niemcy, 2003 1 dzień.
- 7. University of Birstol, Bristol, Wielka Brytania, 2008 1 dzień.

W/

4. Konferencje i seminaria

a) Zaproszone wykłady

- 1. Andreev bound states in ferromagnet-superconductor nanostructures, III International Workshop on Magnetism and Superconductivity of Advanced Materials, Lądek Zdrój (2002).
- 2. FFLO state in FM/SC heterostructures, International Conference on Nanoelectronics, Lancaster, Wielka Brytania (2003).
- 3. Current carrying states in a ferromagnet-superconductor proximity system, International Workshop on Bogoliubov - de Gennes Equations for Superconductors, Bristol, Wielka Brytania (2003).
- 4. Skaningowa mikroskopia tunelowa nanodrutów złota: eksperyment i teoria, III Seminarium STM/AFM 2004 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań', Zakopane (2004).
- 5. Jednowymiarowe nanostruktury czy poprawnie interpretujemy obrazy STM, II Krajowa Konferencja Nanotechnologii, Kraków (2008).
- 6. Podstawy mikroskopii STM i spektroskopii STS, Szkoła SPM, Kraków (2008).
- 7. Quantum Size Effects in tunneling microscopy, 5th International Symposium on Scanning Probe Spectroscopy and Related Methods, Wąsowo (2009).
- 8. Ag na powierzchni Si(557)-Au: struktura i właściwości elektronowe, VI Seminarium STM/AFM 2010 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań', Zakopane (2010).
- 9. Fizyka nanostruktur z pierwszych zasad, XLI Zjazd Fizyków Polskich, Lublin (2011).

b) Referaty

- 10. *Efekty wielociałowe w kropkach kwantowych*, Obóz Naukowy 'Kwantowa teoria materii 2000', Kazimierz Dolny (2000).
- 11. Diamagnetic response of normal metal superconductor interface, 1st Annual Meeting of the Research Training Network 'Computational Magnetoelectronics', Budapeszt, Węgry (2001).

- 12. Current carrying ground states in ferromagnetic-superconductor heterostructures, 2nd Annual Meeting of the Research Training Network 'Computational Magnetoelectronics', Oleron, Francja (2002).
- Spontaneous currents in ferromagnet-superconductor heterostructures, XI Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa 'Zjawiska kolektywne i ich współzawodnictwo', Kazimierz Dolny (2005).
- 14. High resolution scanning tunneling spectroscopy of ultrathin Pb on the Si(111)- (6×6) Au substrate, 43rd IUVSTA Workshop 'Chemical Sensitivity in Scanning Probe Microscopy', Zakopane (2005).
- 15. Thermoelectric effects in STM tunneling through a monoatomic chain, XXX International Conference of Theoretical Physics 'Electron Correlations in Nano- and Macrosystems', Ustroń (2006).
- 16. Zjawiska termoelektryczne w skaningowej mikroskopii tunelowej monoatomowych łańcuchów, IV Seminarium STM/AFM 2006 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań', Zakopane (2006).
- Electronic and structural properties of Pb chains on Si(335)-Au surface, 3rd International Workshop on Surface Physics 'Nanostructures on Surfaces', Polanica Zdrój (2007).
- Thermoelectric phenomena in quantum dot systems, 13 Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa 'Nadprzewodnictwo, uporządkowanie spinowe i ładunkowe', Lądek Zdrój (2007).
- 19. Ag chains on highly ordered Si(557) surface, 4th International Workshop on Surface Physics: Surfaces and Nanostructures, Lądek Zdrój (2009).
- 20. Thermoelectric properties of a quantum dot coupled to ferromagnetic and superconducting leads, XXXIV International Conference of Theoretical Physics: Correlations and Coherence at Different Scales, Ustroń (2010).
- Band structure engineering of atomic chains: Pb, In and Ag on the Si(111)5×2-Au, 28th European Conference on Surface Science, Wrocław (2011).

c) Plakaty

22. Modified slave boson approach to strongly correlated system: normal and superconducting state, VII Krajowe Sympozjum Nadprzewodnictwo Wysokotemperaturowe, Międzyzdroje (1997).

- 23. Do Van Hove singularities in the leads influence tunneling current through quantum dot ?, XXVII International School on Physics of Semiconducting Compounds, Ustroń-Jaszowiec (1998).
- 24. Superconductivity in correlated system: modified slave boson study, The Second Polish-US Conference on High Temperature Superconductivity, Karpacz (1998).
- 25. Description of correlated electrons on Anderson impurity via modified slave boson technique, XXII School of Theoretical Physics 'Quantum Coherence in Superconductors and Nanostructures', Ustroń (1998).
- 26. Superconductivity in correlated systems: from Hartree-Fock approximation to modified slave boson technique, Fifth Dutch-Polish Colloquium 'Correlations and Novel Materials', Groningen, Holandia (1999).
- 27. Superconductivity in correlated systems, VIII Krajowe Sympozjum Nadprzewodnictwa Wysokotemperaturowego, Gdańsk-Sobieszewo (1999).
- 28. Two level quantum dot asymmetrically coupled to external leads, XXIX International School on the Physics of Semiconducting Compounds, Ustroń-Jaszowiec (2000).
- 29. Nonequilibrium Kondo effect in quantum dots, XII Workshop on Strongly Correlated Electron System, Triest, Włochy (2000).
- 30. Nonequilibrium Kondo effect in quantum dots, Minisymposium on Correlation in Mesoscopic Systems, Triest, Włochy (2000).
- 31. Spectral functions of the quantum dot coupled to normal and/or superconducting leads, XXIV School of Theoretical Physics, 'Transport phenomena from quantum to classical regimes, Ustroń (2000).
- 32. Spin polarized currents at ferromagnet-superconductor interface, 19th General Conference of the EPS Condensed Matter Division, Brighton, Wielka Brytania (2002).
- Properties of monoatomic chains on vicinal Si(335)-Au surface, XXVIII International Conference of Theoretical Physics 'Electron Correlations in Nano and Macrosystems', Ustroń (2004).
- 34. Electron transport through a strongly correlated monoatomic chain, International Workshop on Surface Physics 2005 'Advanced and Biomaterials', Polanica Zdrój (2005).
- 35. *STM tunneling through a quantum wire with side attached impurity*, 4th International Conference on Scanning Probe Spectroscopy, Hamburg, Niemcy (2006).
- 36. Ground state properties of FM-FM'-SC proximity system, XII Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa 'Układy Skorelowanych Elektronów Wczoraj i Dziś', Ustroń (2006).

- 37. First principles study of Pb chains on Si(335)-Au surface, 25th European Conference on Surface Science, Liverpool, Wielka Brytania (2008).
- First principles study of Pb chains on Si(335)-Au surface, XXXII International Conference of Theoretical Physics 'Coherence and Correlations in Nanosystems', Ustroń (2008).
- Monoatomowe łańcuchy Pb na zrekonstruowanej powierzchni Si(335), V Seminarium STM/AFM 2008 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań', Zakopane (2008).
- 40. Strongly anisotropic diffusion on Si(553)-Au surface, 5th International Workshop on Surface Physics 'Surfaces and Nanostructures', Lądek Zdrój (2011).

d) Seminaria

- 41. Instytut Fizyki Molekularnej PAN, Poznań (2000)
- 42. H. H. Wills Physics Laboratory, University of Bristol, Bristol, Wielka Brytania (2002)
- 43. Department of Nanoscience, Delft University of Technology, Delft, Holandia (2002).
- 44. Department of Computational Materials Science, University of Twente, Enschede, Holandia (2003)
- 45. Daresbury Laboratory, Warrington, Wielka Brytania (2003)
- 46. Institut für Theoretische Festkörperphysik, Universität Karlsruhe, Karlsruhe, Niemcy (2003)
- 47. Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski, Katowice (2004)
- 48. Konwersatorium Instytutu Fizyki UMCS (1998 i 2010)
- 49. Seminarium Katedry Fizyki Teoretycznej IF UMCS (2010)
- 50. Około 20 wystąpień na seminariach doktoranckich IF UMCS.

5. Współudział w organizacji konferencji

- 1. International Workshop on Surfaces and Nanostructures Characterization, Lublin (2009).
- 2. XV Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa 'Sto lat nadprzewodnictwa', Kazimierz Dolny (2011).

14/10

6. Doświadczenie edytorskie

1. Acta Physica Polonica A, (2012), Proceedings of the XV-th National School 'Hundred Years of Superconductivity', Kazimierz Dolny (2001), Guest Editor wspólnie z profesorem Karolem I. Wysokińskim i profesorem Tadeuszem Domańskim.

KAA

7. Projekty badawcze

- 1. Nadprzewodnictwo w układach z lokalnym parowaniem: efekt nieporządku, oddziaływania elektron-bozon oraz anizotropii, grant KBN nr 2P03B 031 11 (1996-1999), wykonawca.
- 2. Korelacje w układach normalnych i nadprzewodzącyh, grant promotorski KBN nr 2P03B 106 17 (1999-2000), wykonawca.
- 3. Transportowe i elektromagnetyczne własności skorelowanych układów nieuporządkowanych, grant KBN nr 2P03B 106 18 (2001-2002), wykonawca.
- 4. Computational Magnetoelectronics Research Training Network, projekt unijny nr HPRN-CT-2000-00143 (2001-2003), wykonawca.
- 5. Elektronika spinowa Podstawy teoretyczne spinowych elementów informatyki kwantowej, projekt zamawiany nr PBZ/KBN/044/P03/2001 (2002-2004), wykonawca.
- 6. Odziaływania adatomów z jednowymiarowymi atomowymi łańcuchami na wicynalnych powierzchniach monokryształów Si, grant KBN nr 1P03B 004 28 (2005-2007), wykonawca.
- 7. Struktura elektronowa sieci klasterów i drutów kwantowych Pb i In na powierzchni krzemu, grant MNiSW nr N202 081 31/0372 (2006-2009), wykonawca.
- 8. Przewodnictwo i struktura elektronowa atomowych łańcuchów na wicynalnych powierzchniach Si, grant MNiSW nr N N202 1468 33 (2007-2009), wykonawca.
- 9. Przejścia fazowe a domieszkowanie łańcuchów atomowych na powierzchni Si, grant MNiSW nr N N202 3309 39 (2010-2012), wykonawca.
- Dyfuzja atomów w jednowymiarowych kanałach, grant NCN nr 2011/01/B/ST3/04450 (2011-2013), kierownik.

8. Recenzje prac naukowych

- 1. Acta Physica Polonica A 3
- 2. Computational Materials Science 1
- 3. Journal of Low Temperature Physics 1
- 4. Journal of Materials Research 1
- 5. Journal of Physics: Condensed Matter 1
- 6. Physica A 1
- 7. Physica Status Solidi B 2
- 8. Physical Review B 33
- 9. Physical Review E 1
- 10. Physical Review Letters 9
- 11. Physics Letters A 1

14/1t

9. Dydaktyka

- 1. Nanostruktury i metamateriały wykład.
- 2. Seminarium.
- 3. Podstawy fizyki ćwiczenia.
- 4. Fizyka fazy skondensowanej ćwiczenia.
- 5. Metody mikroskopowe i dyfrakcyjne ćwiczenia.
- 6. Numeryczne metody opracowania i wizualizacji wyników pomiarów laboratorium.
- 7. I pracownia laboratorium.
- 8. II pracownia laboratorium.
- 9. Pracownia specjalistyczna fizyki ciała stałego laboratorium.

M

10. Propagowanie fizyki

- 1. *Swiat w nanoskali skaningowa mikroskopia tunelowa*, XVI Spotkania z Fizyką oraz Dni Otwarte UMCS, Lublin (2007).
- 2. Jak wygląda atom skaningowa mikroskopia tunelowa, XIX Spotkania z Fizyką, Lublin (2010).
- 3. *Skaningowa mikroskopia tunelowa*, wykład dla uczestników finału konkursu 'Rok przed maturą', Lublin (2010).
- 4. Swiat w nanoskali skaningowa mikroskopia tunelowa i mikroskopia sił atomowych, VII Lubelski Festiwal Nauki, Lublin (2010).
- 5. Czynny udział w wystawie poświęconej Wielkiemu Zderzaczowi Hadronów (LHC), Lublin (2009).
- 6. Udział w Dniach Otwartych UMCS w latach 2007-2010.

11. Nagrody

1. Nagroda indywidualna Rektora UMCS (2010).

KAB

V. Statystyka

1. Publikacje

- 1. Całkowita liczba publikacji w czasopismach z listy JCR: 37.
 - liczba publikacji przed uzyskaniem stopnia doktora: 4.
 - liczba publikacji po uzyskaniu stopnia doktora: 33.
- Całkowita liczba pozostałych publikacji: 13
 liczba publikacji przed uzyskaniem stopnia doktora: 6.
 liczba publikacji po uzyskaniu stopnia doktora: 7.
- 3. Sumaryczny impact factor publikacji (zgodnie z rokiem opublikowania): 77.928.
- 4. Całkowita liczba cytowań publikacji wg. bazy Web of Science: 275.
- 5. Liczba cytowań bez autocytowań wg. bazy Web of Science: 190.
- 6. Indeks Hirscha (h-index) opublikowanych prac wg. bazy Web of Science: 9.
- 7. Liczba publikacji będących podstawą o ubieganie się o stopień doktora habilitowanego: 11.
- 8. Całkowita liczba cytowań publikacji będących podstawą o ubieganie się o stopień doktora habilitowanego wg. bazy Web of Science: 69.
- 9. Sumaryczny impact factor publikacji będących podstawą o ubieganie się o stopień doktora habilitowanego: 35.540.

2. Konferencje

- 1. Całkowita liczba prezentacji konferencyjnych: 40.
- 2. Liczba zaproszonych wykładów: 9.
- 3. Liczba referatów: 12.
- 4. Liczba prezentacji plakatowych: 19.

3. Recenzje prac naukowych

1. Całkowita liczba recenzji prac naukowych: 54.

Lublin, 31 stycznia 2012 r.

Montusc Knewler

49