

Recenzja pracy doktorskiej

Pani mgr Barbary Szukiewicz

„Termoelektryczne właściwości transportowe nano-struktur na bazie kropek kwantowych”

W ostatnich kilkunastu latach zrobiono duży postęp w konstrukcji układów z ciał stałych, które wykazują efekty kwantowe. Dostarczają one struktur, zwanych często nanostrukturami, w których mogą być badane zarówno teoretycznie jak i doświadczalnie ciekawe ich własności, szczególnie transport elektronów. Co więcej, priorytetem są obecnie miniaturowe urządzenia z kilkoma elektronami budowane i badane w ramach nanotechnologii i nanofizyki do zasilania których potrzeba bardzo mało energii.

Ważnym obiektem badań współczesnej technologii jest poszukiwanie nowych sposobów konstrukcji urządzeń elektrycznych do zasilania których wykorzystywana jest energia tracona np. ciepło rozpraszane. Oczekujemy, że takie nanoukłady będą wykazywać interesujące własności, jako że ich działanie opiera się o prawa mechaniki kwantowej, a nie klasycznej.

Jednymi z ważnych nanoukładów są kropki kwantowe (QD's), opanowano już dobrze metody ich otrzymywania oraz manipulowania ich własnościami. Kropki kwantowe są atrakcyjnymi kandydatami do zastosowania ich m.in. do zapisu i przetwarzania kwantowej informacji. W szczególności spiny zlokalizowanych elektronów w układach posiadających słabe oddziaływanie nadsubtelne mogą mieć zastosowanie jako nośniki informacji kwantowej z powodu stosunkowo długich czasów koherencji spinowej. Jeśli QD's połączymy z elektrodami możemy badać zjawiska transportu.

W przedstawionej mi do recenzji pracy doktorskiej badane są własności transportowe nanostruktur zbudowanych na bazie kropek kwantowych (QD's). Praca doktorska Pani mgr Szukiewicz składa się z 7 rozdziałów. Po wstępie w którym autorka opisuje zwięźle cel pracy, doktorantka przedstawia metody

rachunkowe używane do obliczeń zarówno w przybliżeniu liniowym jak i nieliniowym. Metody obliczeniowe zostały poprawnie wybrane, także rachunki wykonane pozwalają na dobry opis zagadnienia. Nanoskopowym „jądrem” układu jest tu układ dwóch QD's. Te dwie kropki mogą być połączone na różne sposoby z elektrodami i między sobą, co stwarza wieloparametrowy układ i duże możliwości konstrukcji różnych urządzeń sterowalnych przez zmianę parametrów z zewnątrz. Cel pracy jest dobrze określony - takie układy powinny być dokładnie przebadane ze względu na możliwości ich zastosowań w elektronice, spintronice oraz również w komputerach kwantowych.

Następnie autorka opisuje teoretycznie, za pomocą Hamiltonianu typu Andersona, układ dwóch kropek sprzężonych elektrostatycznie (bez lub w obecności pola magnetycznego B) umieszczonych między elektrodami oddziałującymi z kropkami poprzez sprzężenie tunelowe. Elektrody posiadają różne temperatury i potencjały chemiczne, a więc autorka może badać takie ważne wielkości jak prądy elektryczne, spinowe i cieplne, przewodnictwo elektryczne i cieplne, termosiłę i współczynnik dobroci. Transport indukowany jest napięciem i/lub różnicą temperatur elektrod, w pracy tej doktorantka dyskutuje przede wszystkim transport termoelektryczny.

Do opisu nanoukładów trzeba stosować zasady mechaniki kwantowej, co istotnie odróżnia ich własności od układów makroskopowych. Autorka dyskutuje w swej pracy przypadek, w którym zakłada brak przepływu elektronów między QD's i brak przejść między poziomami energetycznymi na danej kropce tzn. układ pracuje w niskiej temperaturze.

Praca doktorska opiera się na czterech pracach naukowych, opublikowanych w dobrych czasopismach naukowych, uzupełnionych streszczeniem i opisem metod obliczeniowych. Pracę kończy podsumowanie wyników i opublikowane prace. W trzech pracach doktorantka jest pierwszym autorem.

Poniżej omówię krótko niektóre zagadnienia wchodzące w skład rozprawy.

W pierwszej części pracy autorka rozważa, w modelu tunelowania sekwencyjnego, metodą równań mistrza, transport termoelektryczny w układzie (w obecności lub bez pola magnetycznego) zawierającym dwie równoległe kropki w kontakcie z dwoma elektrodami w których elektrony mogą oddziaływać kulombowsko w kropkach lub między kropkami. Połączenia między QD's a elektrodami są złączami tunelowymi. Obliczono prąd elektryczny, prąd spinowy i prąd cieplny wywołany różnicą potencjałów i/lub różnicą temperatur. Rozważania przeprowadzono tu głównie w przybliżeniu jednopoziomowym dla QD's, co jest słuszne dla małej ilości elektronów i niskich temperatur. Pokazano, że efektywność urządzenia przetwarzającego ciepło w energię elektryczną zależy bardzo istotnie od różnych parametrów układu co pozwala na ich sterowalność. Pozwala to m.in. określić zakres parametrów w którym układ pracuje jako silnik termoelektryczny, a kiedy jako chłodziarka. Obliczenia te mogą posłużyć fizykom wykonującym doświadczenia

do sterowania pracą urządzeń, a także sprawdzić prawdziwość przedstawionych tu wyliczeń. Przebadano wpływ oddziaływań coulombowskich w kropce kwantowej (QD) i między QD's na moc i sprawność układu – pokazano, że w pierwszym przypadku zależność ta ma charakter nieliniowy, w drugim przypadku silnie zmniejsza efektywność urządzenia. Wyliczono też współczynnik dobroci układu (ZT) istotny dla określenia przydatności materiału do zastosowań termoelektrycznych w materiałach klasycznych (makroskopowych). Ważnym i ciekawym wynikiem jest fakt, że w odróżnieniu od tych materiałów, badane nano-urządzenie jest często słabym przetwarzaczem energii cieplnej na elektryczną dla parametrów układu gdzie współczynnik ZT jest bardzo duży.

Przedyskutowano też inny ciekawy przypadek - pokazano, że w przypadku dwóch kropek w polu magnetycznym B można niezależnie sterować, przy pomocy napięć na bramkach, poziomami energetycznymi tak, że taki układ może przewodzić indukowany temperaturowo (lub napięciowo) czysty prąd spinowy (tj. przy nieobecności prądu ładunkowego) ważny w zastosowaniach spintronicznych. Co więcej, przy pomocy napięcia na bramce, można kontrolować kierunek prądu spinowego czyli inną ważną własność układu spintronicznego. Ponieważ układ taki pracuje z jednym lub kilkoma elektronami nazywamy często takie układy nano-spintronicznymi; są one z pewnością bardzo ważne z punktu widzenia zastosowań, gdyż do ich zasilania potrzeba mało energii. Nasuwa się tu pytanie. Jak jest tu przyłożone pole magnetyczne oddziałujące na QD's, a nie na elektrody?

W drugiej części pracy doktorantka dyskutuje w przybliżeniu liniowym i nieliniowym efektywny nano-silnik cieplny. Badane urządzenie składa się z trzech elektrod i dwóch QD's połączonych tak, że prąd cieplny i elektryczny mogą być niezależnie kontrolowane. Pozwala to optymalizować pracę silnika. Przedstawiono mikroskopowy model układu w którym centralna elektroda ma wysoką temperaturę, a dwie pozostałe mają niższą temperaturę. Potencjały chemiczne elektrod mogą być zmieniane przez napięcie elektryczne lub w wyniku różnicy temperatur. Do obliczeń zastosowano najpierw formalizm Landauera, a następnie metodę nierównowagowych funkcji Greena. Najważniejszymi charakterystykami układu są maksymalna moc i maksymalna sprawność osiągana przy maksymalnej mocy. Obliczenia, w przybliżeniu liniowym i nieliniowym, pozwoliły wyznaczyć zespół parametrów takich jak odległość poziomów energetycznych kropek, różnica temperatur między elektrodą gorącą i zimnymi oraz wartość sprzężenia tunelowego przy którym silnik osiąga optymalną wydajność. Co ciekawe, efekty ekranowania w przybliżeniu nieliniowym zmieniają wartość niektórych parametrów, ale maksymalna moc i sprawność pozostają praktycznie niezmiennicze w obu przybliżeniach. Pokazano też, że asymetria temperaturowa i asymetria sprzężeń nie mają istotnego wpływu na optymalną pracę silnika termoelektrycznego.

Przydałyby się tu krótkie rozważania jak te prace mogą zostać wykorzystane do projektowania i budowy nanourządzeń elektronicznych i spinotronicznych.

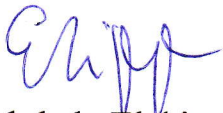
Praca jest napisana jasno i przejrzysto. Zauważyłam parę niejasności i błędów, parę z nich tu przytoczę. Autorka mało precyzyjnie definiuje QD's, które są tu najważniejszym badanym obiektem. Moim zdaniem przydałaby się informacja z jakich materiałów buduje się kropki, jakiego rzędu są ich rozmiary i jakiego rzędu są odległości między poziomami. Podane są tylko względne jednostki co utrudnia wyobrażenie sobie takiego układu. Na stronie 7 doktorantka pisze „... tunelowanie kolejnego elektronu wymaga energii U co prowadzi do blokady coulombowskiej i innych zjawisk. To ostatnie stwierdzenie wydaje się mało zrozumiałe. Na str. 26 podany jest inny zapis funkcji Fermiego niż w definicji na str.27. Na str. 40 wprowadzono współczynnik $T(\epsilon)$ którego definicja podana jest dopiero na str.55. Na str.34 wprowadzono pojęcie napięcia bramki które nie było, jak mi się wydaje, definiowane wcześniej, co może być niezrozumiałe dla czytelnika.

Parę drobnych błędów technicznych, które zauważyłam, a których nie będę tu przytaczać nie umniejszają wartości pracy.

Praca zawiera wiele wartościowych wyników, które poszerzają naszą wiedzę o transporcie przez nanoukłady o geometrii kropek kwantowych. Wyniki tej pracy są istotne, ponieważ stanowią bazę teoretyczną dla układów które można obecnie konstruować przy pomocy wyrafinowanych metod nanotechnologii, a które będą pracowały na bazie praw mechaniki kwantowej.

Praca spełnia wszystkie wymogi stawiane pracom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie mgr Barbary Szukiewicz do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Katowice 14.8.2018


Prof. dr hab. Elżbieta Zipper