

prof. dr hab. Witold Bardyszewski
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski
ul. Pasteura 5, 00-681 Warszawa

Ocena osiągnięć naukowych dr. inż. Jarosława Pawłowskiego w postępowaniu habilitacyjnym.

Pan dr inż. Jarosław Pawłowski uzyskał tytuł magistra inżynierii fizyki komputerowej oraz doktorat nauk fizycznych w Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie odpowiednio w latach 2009 i 2014. Od roku 2019 jest zatrudniony na stanowisku adiunkta na Politechnice Wrocławskiej. Jego działalność naukowa obejmuje dwie zasadnicze grupy tematów - fizykę kubitów na bazie nanostruktur oraz uczenie maszynowe. Cykl siedmiu artykułów przedłożonych jako podstawa habilitacji zawiera się w tej pierwszej grupie i dotyczy analizy potencjalnych możliwości wykorzystania tzw. dolinowego stopnia swobody występującego w dwuwymiarowych chalcogenkach metali przejściowych jako podstawy działania kubitów na bazie kropek kwantowych. Prace te opublikowane w latach 2018-2024 układają się w logiczny ciąg ilustrujący rozwój idei i metod rozwijanych przez habilitanta i z całą pewnością spełniają kryterium powiązania tematycznego. Ukazały się one w renomowanych, recenzowanych czasopismach międzynarodowych o wysokim czynniku wpływu (IF): cztery artykuły w Physical Review B, oraz po jednym artykule w Physical Review Applied, New Journal of Physics i npj: 2D Materials and Applications. Zważywszy, że dr inż. Jarosław Pawłowski jest pierwszym autorem pięciu artykułów w serii (w tym jeden artykuł jest jednoautorski) oraz biorąc uwagę załączone oświadczenia współautorów należy stwierdzić, że odegrał on decydującą rolę przy ich powstaniu. Bliższa analiza treści artykułów prowadzi do wniosku, że mamy do czynienia z oryginalnym osiągnięciem naukowym habilitanta.

1. Omówienie osiągnięcia naukowego będącego podstawą habilitacji.

Obliczenia kwantowe polegają na kontrolowanej ewolucji układu kubitów poprzez sukcesywne działanie bramek na poszczególne grupy (typowo dwóch) kubitów. Modelowy kubit odpowiada dowolnemu dwupoziomowemu układowi kwantowemu. W praktyce jednak spełnienie podstawowych kryteriów umożliwiających obliczenia kwantowe z udziałem kubitów

stanowi poważne wyzwanie techniczne odnośnie precyzyjnej kontroli inicjalizacji, ewolucji jak i odczytu stanu kwantowego każdego kubitów przy zapewnieniu minimalnej dekoherencji. Chociaż udało się zrealizować systemy oparte na pułapkach jonowych, kubitach nadprzewodzących czy też układach fotonicznych, to ciągłym wyzwaniem pozostaje możliwość skalowania - budowy komputera zawierającego wielu wzajemnie skomunikowanych kubitów. Pod tym względem idealne wydają się rozwiązania wykorzystujące układy na bazie ciała stałego, a w szczególności kropki kwantowe w nanostrukturach krystalicznych. Między innymi z tego punktu widzenia, dwuwymiarowe materiały takie jak krystalizujące w strukturze heksagonalnej chalcogenki metali przejściowych przyciągnęły w ostatnich latach uwagę wielu grup badawczych. Materiały te mogą występować w postaci jednowarstwowej lub kilkuwarstwowej i wykazują unikalne własności elektronowe z uwagi na uwięzienie elektronów w warstwie o praktycznie atomowej grubości.

W tym nurcie badań należy umiejscowić cykl artykułów stanowiący rozprawę habilitacyjną. Dzieli się on na dwie grupy zagadnień: prace [1]-[4] oraz [6] dotyczą modelowania kubitów na bazie kropek kwantowych w pojedynczej warstwie MoS_2 natomiast artykuły [5] i [7] poświęcone są analizie transportu balistycznego w wąskim kanale WSe_2 . Rozprawa generalnie dotyczy struktur, w których ruch elektronu w płaszczyźnie warstwy jest ograniczony do obszaru o rozmiarach rzędu nanometrów za pomocą układu bramek sterujących. Habilitant opracował jednolitą, oryginalną metodę numerycznego wyznaczania rozkładu potencjału w takich układach w ramach przybliżenia pola samouzgodnionego uwzględniającą zarówno potencjały bramek jak i podatność dielektryczną otoczeniu. Struktura elektronowa rozpatrywanych obiektów jest modelowana na poziomie atomowym metodą ciasnego wiązania. Warto podkreślić, że z uwagi na złamaną symetrię translacyjną oraz ogromną liczbę rozpatrywanych atomów niezbędne było odwołanie się do przestrzeni Hilberta o ogromnej liczbie wymiarów, co w oczywisty sposób zwiększa wysiłek obliczeniowy.

W części poświęconej kubitom analizowane są stany elektronowe MoS_2 z okolic dna pasma przewodnictwa w pobliżu nierównoważnych punktów K i -K strefy Brillouina jako potencjalne stany kubitów. W nieobecności pola magnetycznego są one połączone w zdegenerowane energetycznie dublety Kramersa stanów o przeciwnych spinach. Permanentne związanie wartości spinu z doliną (czyli wektorem falowym) elektronu pozwala na kontrolę tak rozumianego kubitów poprzez oddziaływanie na przestrzenną jak i spinową składową funkcji falowej elektronu.

W pracy [1] zaproponowano model kubitów z pojedynczym elektronem w warstwie MoS_2 uwięzionym w kropce kwantowej zdefiniowanej przez bramki boczne. Układ dwupoziomowy takiego kubitów stanowią spinowo-orbitalnie rozszczepione stany kwantowe o tym samym spinie odpowiadające dwóm dolinom pasma przewodnictwa w punktach K i -K strefy Brillouina. W tym konkretnym przypadku struktura pasmowa warstwy MoS_2 uwzględnia jedynie 3 orbitale typu d na atomach metalu co wystarczy do wyznaczenia najniższych stanów elektronu w paśmie przewodnictwa w funkcji kształtu potencjału kropki poprzez samouzgodnione rozwiązanie równania Schrödingera i Poissona. Numeryczny eksperyment wykazał, że kontrola kubitów może być realizowana przez przyłożenie harmonicznie oscylującego potencjału bramki definiującej kropkę. Dla rezonansowej częstości drgań można zrealizować pełny okres oscylacji Rabi'ego, a więc pełny cykl obrotu kubitów (K,-K). Wspomniano przy tym o ważnym elemencie działania kubitów tj. odczycie jego stanu. Dzięki zablokowaniu pędu (K) ze spinem można tutaj wykorzystać efekt blokady Pauliego. Na zakończenie artykułu pojawia się interesujące odniesienie do modelowego hamiltonianu ciągłego, który przy odpowiednio dobranych parametrach praktycznie odtwarza wyniki pełnego rachunku. Modelowy hamiltonian zawiera dodatkowy wyraz Bychkova-Rashby, który w zasadzie nie ma związku z wynikami tej publikacji, ale jest zapowiedzią tego co się będzie działo dalej.

W następnej publikacji [2] rzeczywiście zademonstrowano jak sprzężenie Rashby kontrolowane zewnętrznym prostopadłym polem elektrycznym może być zastosowane do odwracania spinu. Na poziomie modelowania wymagało to daleko idącego uściślenia metody ciasnego wiązania poprzez rozszerzone o dodatkowe orbitale w celu wierniejszego opisanie widma elektronowego w obecności pola elektrycznego i sparametryzowania członu Bychkova-Rashby w efektywnym hamiltonianie. Dodatkowe rozszczepienie stanów spinowych przez zewnętrzne pole magnetyczne prowadzi do swoistego „hybrydowego kubitów” - tj układu o czterech poziomach scharakteryzowanych przez różne wartości spinu i doliny. Realizując różne możliwe przejścia w takim układzie zademonstrowano operacje typu SWAP oraz kluczową dla obliczeń kwantowych operację CNOT.

Ciekawy pomysł na realizację operacji 2-kubitowych z udziałem dolinowego stopnia swobody przedstawiony jest w publikacji [3]. Rolę czterech stanów kwantowych potrzebnych do ich realizacji pełnią rozszczepione przez oddziaływanie spin-orbita trzy stany trypletowe i jeden stan singletowy w układzie dwóch kropek kwantowych położonych w jednej płaszczyźnie połączonych wąską barierą tunelową. Dodatkowo układ umieszczono w prostopadłym polu

magnetycznym. Operacje na kropkach przeprowadza się za pomocą oscylacji potencjału uwięzienia. Z kolei manipulowanie wysokością bariery modyfikuje wymianę między kropkami, co pozwala na wykonanie operacji typu SWAP w kontrolowanym czasie rzędu kilkudziesięciu pikosekund. Autorzy udowodnili, że w takim układzie możliwy jest odczyt stanu pojedynczej kropki z wykorzystaniem mechanizmu blokady Pauliego ze względu na zmienną dolinową. Dokładne rachunki na poziomie atomistycznym z uwzględnieniem realistycznego modelu oddziaływania kulombowskiego sprawiają, że otrzymane wyniki ilościowe są wiarygodne.

Ważnym problemem ograniczającym operowanie na kubitach dolinowych za pomocą pól elektrostatycznych jest słabość sprzężenia między stanami o wysokich pędach K i $-K$. W realnym świecie wielkość sprzężenia jest kluczowa z uwagi na nieuniknioną dekoherencję. Temu zagadnieniu poświęcone są pozostałe artykuły [4] i [6]. W szczególności w [4] zaproponowano, aby wzmóc sprzężenie międzypolinowe za pomocą oddziaływania spin-orbita typu Rashby wymuszone przez bramkę wertykalną. W takim układzie zewnętrzne pole elektryczne posiadające odpowiednio dużą składową w płaszczyźnie kropki może efektywnie sprzęgać stany różniące się spinem i doliną. Nerozwiązanym problemem technicznym pozostaje źródło takiego pola. Ciekawe rozwiązanie tego dylematu pojawia się w pracy [6]. Zaproponowano w niej strukturę kropki kwantowej z lateralnym heterozłączeniem między MoS_2 i WSe_2 , charakteryzującym się obecnością warstwy dipolowej w rejonie złącza. Potencjał złącza umożliwia rozpraszanie pod dużym kątem, między K i $-K$, a jego wpływ na stan elektronu może być kontrolowany za pomocą bramek definiujących potencjał kropki. Okazało się, że najbardziej efektywne sprzężenie zachodzi gdy złącze ma tzw. kierunek „armchair”. Zaproponowano w związku z tym ciekawą geometrię heterozłącza z załamanym interfejsem. Ewolucja dolinowej fazy geometrycznej w wyniku kontrolowanego ruchu paczki falowej wzdłuż takiego heterozłącza stanowi nowy, interesujący mechanizm manipulowania dolinowym stopniem swobody.

Druga część rozprawy habilitacyjnej może być scharakteryzowana następująco. Publikacja [5] ujawnia, że pomiar kwantowego transportu dziurowego w kanale kwantowym z dwuselenku wolframu WSe_2 wykazuje kwantyzację przewodności z krotnością e^2/h , co przeczy spodziewanej podwójnej degeneracji kanałów kwantowych wywołanej symetrią odbicia czasu. Ważny wkład do części teoretycznej tej pracy pochodzi od habilitanta. Wspólnie z grupą prof. P. Hawrylaka i współpracownikami udowodnił on, że takiego wyniku nie można uzasadnić na gruncie teorii jednoelektronowej w ramach modelu ciasnego wiązania. W ostatnim artykule z serii podjęto zatem próbę wyjaśnienia tego zjawiska na gruncie teorii wielu

ciał z uwzględnieniem oddziaływania między dziurami. Stan podstawowy 6 dziur w przybliżeniu Hartree-Focka, przy odpowiednio silnym oddziaływaniu jest maksymalnie dolinowo spolaryzowany, ale metoda średniego pola nie jest w tym przypadku specjalnie wiarygodna. Dokładna diagonalizacja czyli obliczenia metodą oddziaływania konfiguracji (CI) wykazują, że stan podstawowy układu ma postać trypletu. Degeneracja stanu trypletowego może być zniesiona przez zewnętrzne pole magnetyczne lub efekt Rashby wywołany przez boczne pole elektryczne w kanale kwantowym, co efektywnie prowadzi do częściowej polaryzacji dolinowej i kwantowania przewodności w jednostkach e^2/h . Analiza funkcji korelacji w układzie oddziałujących dziur ujawniła istnienie fazy antyferromagnetycznej. W obszarze niskiej koncentracji dziur pojawia się uporządkowana struktura w postaci zygzakowatego kryształu Wignera.

2. Ocena rozprawy.

Pan dr inż. Jarosław Pawłowski stworzył wszechstronny warsztat do badań procesów kwantowych w niskowymiarowych układach mezoskopowych takich jak kropki kwantowe czy kanały kwantowe. Stosując jednolite podejście atomistyczne oparte na rachunku ciasnego wiązania uzyskał interesujące i ważne wyniki o potencjalnie dużym znaczeniu dla obliczeń kwantowych. Najważniejsze osiągnięcie, na które chciałbym zwrócić uwagę to wykazanie, że dolinowy stopień swobody występujący w chalkogenkach metali przejściowych może być z powodzeniem zastosowany w logicznych bramkach kwantowych nowego typu (prace [1]-[4] i [6]). Jestem pod dużym wrażeniem opracowanych przez habilitanta metod sterowania kubitami. Warto podkreślić, że osiągnięte wyniki mają charakter ilościowy i mogą otworzyć drogę do praktycznej realizacji omawianych urządzeń kwantowych.

Drugim ważnym dokonaniem, które otwiera nowe perspektywy, jest realistyczny rachunek wielociałowy na poziomie nano-fizyki zaprezentowany w pracy [7] z zastosowaniem techniki dokładnej diagonalizacji w wielowymiarowej przestrzeni Hilberta. Oprócz ciekawego wyniku odnośnie łamania degeneracji dolinowej w kanale kwantowym mamy tutaj potwierdzenie występowania fazy typu kryształu Wignera w kanale jednowymiarowym.

Chciałbym też zwrócić uwagę, że Autoreferat i inne załączone materiały przygotowano bardzo starannie. Odpowiednio dobrane rysunki w jasny sposób ilustrują prezentowane tezy.

3. Omówienie aktywności naukowej habilitanta.

W dorobku publikacyjnym dr. inż. Jarosława Pawłowskiego zawierają się 34 (w tym 31 opublikowane po doktoracie) artykuły naukowe w recenzowanych czasopismach międzynarodowych. Według Google Scholar były one cytowane 432 razy (325 razy bez autocytowań), a indeks Hirscha jest równy 13. Są to wartości przekraczające przeciętne wyniki osób ubiegających się o stopień doktora habilitowanego. Po doktoracie habilitant wygłosił 12 seminariów oraz uczestniczył w 17 konferencjach naukowych. W ramach pracy w zespołach badawczych kierował trzema grantami oraz brał udział jako wykonawca w czterech. Jego działalność naukowa dotyczy nie tylko fizyki ciała stałego, ale też szeroko rozumianego uczenia maszynowego. Owocna współpraca z przemysłem oraz sukcesy odniesione w tej dziedzinie nie są co prawda przedmiotem niniejszej recenzji, ale warto je odnotować bowiem świadczą pozytywnie o aktywności naukowej. Habilitant współpracuje z wieloma grupami badawczymi w kraju i na świecie, mimo że nie ma na swoim koncie dłuższego stażu w ośrodkach zagranicznych. Warto zwrócić uwagę na zaangażowanie w proces szkolenia młodej kadry na Politechnice Wrocławskiej. Jest on promotorem pomocniczym w dwóch przewodach doktorskich oraz opiekował się w sumie 17 pracami magisterskimi i inżynierskimi. Obecnie sprawuje opiekę nad jedną pracą doktorską i jedną magisterską. Prowadzi też specjalistyczne wykłady i organizuje warsztaty dla studentów.

W mojej ocenie jest to znakomity dorobek na tym etapie kariery naukowej. Na podkreślenie zasługuje wysoki wskaźnik Hirscha, aktywna działalność grantowa oraz zaangażowanie w kształcenie młodej kadry.

4. Wnioski końcowe.

Podsumowując stwierdzam, że oryginalne wyniki naukowe zawarte w przedłożonym cyklu siedmiu artykułów oraz aktywność naukowa habilitanta z naddatkiem spełniają wymagania stawiane przez obowiązującą ustawę „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce”, art. 219 (tekst jedn. Dz.U. z 2024 poz. 1571).

W związku z tym zdecydowanie popieram wniosek o nadanie panu dr. inż. Jarosławowi Pawłowskiemu stopnia naukowego doktora habilitowanego.



Warszawa, 20 marca 2025 r.

prof. dr hab. Witold Bardyszewski