Autoreferat (2024), **0001**:0001 1–31

PODPIS ZAUFANY
JAROSŁAW
PAWŁOWSKI
30.10.2024 02:08:00 [GMT+1]
Dokument podpisany elektronicznie
podpisem zaufanym

Autoreferat w postepowaniu habilitacyjnym

Autoreferat

J. Pawłowski[1]

[1]Instytut Fizyki Teoretycznej, Politechnika Wrocławska, Wrocław, Polska.

Keywords: spintronika, dolinotronika, materiały 2D, bramkowane nanourządzenia

Abstract
Podsumowanie osiągnięć zawodowych. Zawiera wykaz osiągnięć do października 2024. Przygotowany zgodnie z wytycznymi Rady Doskonałości Naukowej (http://www.rdn.gov.pl/postepowanie-habilitacyjne).

Contents

1 Dane osobowe **2**
2 Dyplomy, stopnie naukowe **2**
3 Informacje dotyczące zatrudnienia w instytutach badawczych **2**
4 Opis osiągnięć **2**
4.1 Wstęp . . . 3
4.2 Kubit dolinowy i jego implementacja w materiałach 2D . . . 8
4.3 Spinowo-dolinowe i czysto dolinowe układy dwóch kubitów . . . 12
4.4 Wielociałowe efekty dolinowe . . . 15
4.5 Podsumowanie . . . 19
5 Prezentacja innej znaczącej działalności naukowej lub artystycznej **20**
5.1 Kutryt dolinowy . . . 20
5.2 Inne osiągnięcia po uzyskaniu stopnia doktora . . . 21
5.3 Dane bibliometryczne . . . 22
6 Osiągnięcia dydaktyczne i organizacyjne **22**
6.1 Granty – jako kierownik projektów . . . 22
6.2 Granty – jako wykonawca . . . 22
6.3 Działalność zawodowa . . . 23
6.4 Działalność dydaktyczna i nadzór nad studentami . . . 23
7 Inne informacje **24**
7.1 Krótkie pobyty w instytucjach badawczych po uzyskaniu stopnia doktora . . . 24
7.2 Wykłady na zaproszenie po uzyskaniu stopnia doktora . . . 24
7.3 Udział w konferencjach i warsztatach po uzyskaniu stopnia doktora . . . 24
7.4 Współpraca z grupami badawczymi . . . 25
7.5 Współpraca z przemysłem . . . 25
7.6 Nagrody . . . 26

1. Imię i nazwisko

Jarosław Pawłowski

2. Dyplomy, stopnie nadane w określonych dziedzinach nauki lub sztuki, w tym nazwa instytucji, która nadała stopień, rok nadania stopnia, tytuł rozprawy doktorskiej

- **2014** Doktor nauk fizycznych, Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej. Rozprawa doktorska pt. „Operacje na spinie pojedynczego elektronu w kropce kwantowej bez użycia pola magnetycznego" pod kierunkiem prof. dr. hab. Stanisława Bednarka.
- **2009** Magister inżynier fizyki komputerowej, Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej. Praca magisterska pt. „Modelowanie i prognozowanie finansowych szeregów czasowych z wykorzystaniem modeli multifraktalnych" pod kierunkiem dr. Pawła Oświęcimki.

3. Informacje dotyczące zatrudnienia w instytutach badawczych lub na wydziałach/ katedrach

- **2019-** adiunkt, Politechnika Wrocławska,
- (**2016-2019**) staż podoktorski, Politechnika Wrocławska,
- (**2014-2016**) asystent, Akademia Górniczo-Hutnicza.

4. Opis osiągnięć, określony w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy

Mój dorobek obejmuje siedem publikacji poświęconych badaniom dolinowego stopnia swobody w materiałach 2D i jego zastosowaniom do kwantowego przetwarzania informacji. Składają się na nie następujące publikacje:

- [1] J. Pawłowski, D. Żebrowski, and S. Bednarek, *Valley qubit in a gated MoS_2 monolayer quantum dot*, Phys. Rev. B **97**, 155412 (2018).
- [2] J. Pawłowski, *Spin-valley system in a gated MoS_2-monolayer quantum dot*, New Journal of Physics **21**, 123029 (2019).
- [3] J. Pawłowski, M. Bieniek, and T. Woźniak, *Valley two-qubit system in a MoS_2-monolayer gated double quantum dot*, Phys. Rev. Appl. **15**, 054025 (2021).
- [4] A. Altıntaş, M. Bieniek, A. Dusko, M. Korkusiński, J. Pawłowski, and P. Hawrylak, *Spin-valley qubits in gated quantum dots in a single layer of transition metal dichalcogenides*, Phys. Rev. B **104**, 195412 (2021).
- [5] J. Boddison-Chouinard, A. Bogan, P. Barrios, J. Lapointe, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Pawłowski, D. Miravet, M. Bieniek, P. Hawrylak, A. Luican-Mayer, and L. Gaudreau, *Anomalous conductance quantization of a one-dimensional channel in monolayer WSe_2*, npj 2D Materials and Applications **7**, 50 (2023).
- [6] J. Pawłowski, J. E. Tiessen, R. Dax, and J. Shi, *Electrical manipulation of valley qubit and valley geometric phase in lateral monolayer heterostructures*, Phys. Rev. B **109**, 045411 (2024).
- [7] J. Pawłowski, D. Miravet, M. Bieniek, M. Korkusinski, J. Boddison-Chouinard, L. Gaudreau, A. Luican-Mayer, and P. Hawrylak, *Interacting holes in a gated WSe_2 quantum channel: valley correlations and zigzag Wigner crystal*, Phys. Rev. B **110**, 125147 (2024).

Oprócz powyższej listy, dwie niepublikowane prace [8, 9] nie zostały uwzględnione na liście, ale stanowią kontynuację i uzupełnienie powyższych badań, więc zostaną również krótko omówione w podrozdziałach 4.2 oraz 5.1.

4.1. Wstęp

Celem prewodnim tego osiągnięcia jest wykazanie, że dolinowy stopień swobody obecny w materiałach 2D, takich jak heksagonalne dichalkogenki metali przejściowych, może być wykorzystany do implementacji kubitów, a tym samym do przetwarzania informacji kwantowej w ciele stałym.

Typowa historia o materiałach 2D zaczyna się od grafenu mającego budowę plastra miodu, przedstawionego na Rys. 1(a), z jego fascynującymi właściwościami. Jednak grafen nie jest idealny do zastosowań elektronicznych ze względu na swoją półmetaliczną naturę z zerową przerwą wzbronioną, a zatem nie można go łatwo przełączać elektrycznie, tak jak można to zrobić w przypadku półprzewodników. Oczywiście, przerwę wzbronioną grafenu można otworzyć, ale wymaga to skomplikowanej funkcjonalizacji, np. poprzez tworzenie nanowstęg [10], budowanie heterostruktury (efekt bliskości podłoża) [11, 12], lub przygotowanie dwuwarstwy [13].

Monowarstwowe półprzewodnikowe dichalkogenki metali przejściowych (ang. transition-metal dichalcogenides, TMDs) [14], przedstawione na Rys. 1(b), można uznać za półprzewodnikowy analog grafenu. Posiadają one sporą przerwę pasmową [15, 16], dzięki czemu mogą być łatwo kontrolowane w standardowy sposób poprzez lokalne bramkowanie. Struktura krystalograficzna TMD przypomina strukturę grafenu, ale z różnymi typami atomów w węzłach w podsieciach A i B. Tworzy ona trójkątną sieć z dwoma węzłami w komórce elementarnej: (A) metal przejściowy M i (B) dimer chalkogenu X_2 – patrz Rys. 1(c). Jeśli spojrzymy na strukturę pasmową dla typowej monowarstwy TMD w przestrzeni odwrotnej, lokalne minimum energii w paśmie przewodnictwa (CB) i lokalne maksimum energii w paśmie walencyjnym (VB) spotykają się w przestrzeni pędu w punktach znanych jako *doliny*, jak pokazano na Rys. 1(e). Sześciokątna (lub równoważnie rombowa) strefa Brillouina (BZ) zawiera dokładnie dwie różne doliny, będziemy je oznaczać w tym podsumowaniu jako K i K' pokazane na Rys. 1(d).

Kolejna interesująca właściwość dotyczy struktury spinowej stanu w dolinach w pobliżu krawędzi pasma. Jak pokazano na Rys. 1(f), stany Blocha w krysztale objętościowym (ale przełoży się to również na stany własne kropki kwantowej) tworzą pary o przeciwnych spinach w obu dolinach. Stany w każdej parze, zwane również dubletami Kramersa, są powiązane symetrią odwrócenia czasu (ang. time reversal symmetry, TRS) [17]: $E_\sigma(\mathbf{k}) = E_{-\sigma}(-\mathbf{k})$, co oznacza, że dwa najniższe stany zajmujące obie doliny, tj. $\mathbf{k} = K, K'$ w CB są ze sobą powiązane: $E_\uparrow(K') = E_\downarrow(K)$. Podobną strukturę mamy w przypadku

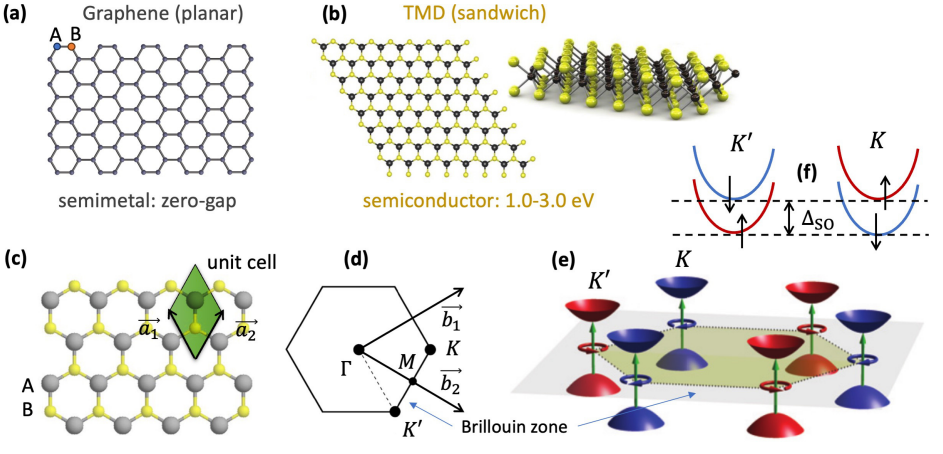

Figure 1. *Popularne dwuwymiarowe materiały monowarstwowe: półmetaliczny grafen (a) i półprzewodnikowe TMD (b). Struktura krystalograficzna TMD (c) składa się z dwóch węzłów w komórce elementarnej: (A) metalu przejściowego M i (B) dimeru chalkogenu X_2. Powstała BZ (d) zawiera dwa nierównoważne punkty: K i K′, w których (e) krawędzie pasm przewodnictwa (walencyjnych) mają minima (maksima) tworzące tzw. doliny. Pasma w dwóch typach dolin mają nietrywialną strukturę spinową (f) tworząc pary stanów (dublety Kramersa) powiązane symetrią odwrócenia czasu.*

VB. Co ciekawe, TMD charakteryzują się również silnym wewnętrznym (atomistycznym) sprzężeniem spin-orbita (SO) [18, 19], co zazwyczaj prowadzi do rozszczepienia spin-orbita Δ_{SO} rzędu setek meV w VB i kilku meV w CB. Obecność sprzężenia SO rozdziela drugą parę Kramersa $E_{\downarrow}(K') = E_{\uparrow}(K)$, jak pokazano na Rys. 1(f), o energię Δ_{SO}. Gdy rozszczepienie SO jest duże, np. w TMD VB może osiągnąć ponad 100 meV, pierwsza para jest silnie odseparowana od drugiej. Wówczas w najniższym stanie w danej dolinie występuje tylko jedna orientacja spinu. Efekt ten nazywamy blokadą spinowo-dolinową.

Inną ważną właściwością TMD jest stosunkowo silne sprzężenie spin-orbita typu Rashby [19, 2], zwiazane z asymetrią odbicia, generowaną przez prostopadłe pole elektryczne. Zarówno wewnętrznie (struktura), jak i zewnętrznie (bramki) oddziaływanie SO Rashby jest kluczowym składnikiem w zastosowaniach spintronicznych, umożliwiając efektywną kontrolę spinów elektronów i dziur w materiałach TMD. Zostanie to szerzej omówione w podrozdziale 4.2.

Monowarstwa TMD składa się z trzech płaszczyzn atomowych utworzonych przez dwa rodzaje atomów: metalu przejsciowego M i pary chalkogenów X_2. Monowarstwa MX_2 ma symetrię grupy punktowej D_{3h}, co oznacza, że ich sześciokątna sieć o strukturze plastra miodu ma trójkrotną symetrię obrotową i jednoczesnie zawiera operację odbicia lustrzanego względem płaszczyzy monowarstwy. Jednak w przypadku monowarstwy (lub dowolnej nieparzystej liczby warstw) kryształ TMD nie ma symetrii środkowej. Brak symetrii środkowej umożliwia fizykę rozróżniającą doliny [20, 21] i pozwala na dostęp do nowego stopnia swobody nośników ładunku, a mianowicie indeksu dolinowego opisującego obsadzenie dolin w przestrzeni k. Otwiera to nową dziedzinę fizyki zwaną *dolinotroniką*. Typowo, możemy użyć metod optycznych, tj. światła spolaryzowanego kołowo, aby obsadzić—zainicjować daną dolinę [22, 23]. Nie jest jednak możliwe bezpośrednie sprzężenie różnych dolin za pomocą metod czysto optycznych. Aby uzyskać sprzężenie, możemy wykorzystać "optyczny efekt Starka" [24, 25]: stworzyć ekscytony w obu dolinach, a następnie powiązać je za pomocą pola elektrycznego. Niemniej jednak manipulacja optyczna nie jest bezpośrednia. Dlatego szukamy bezpośredniego sprzężenia międzydolinowego, najlepiej za pomocą metod elektrycznych, które można potem łatwo skalować do większych struktur.

Dwuwymiarowe materiały TMD oferują unikalną platformę do projektowania bramkowanych spinowych i dolinowych obwodów kwantowych ze względu na łatwość dostrajania struktury bramek i ich właściwości elektrycznych. Wynika to z bliskości bramek do materiału 2D, dużej przerwy pasmowej, wysoce kontrolowanego środowiska dielektrycznego, a także silnego sprzężenia spin-orbita i dolinowego stopnia swobody obecnego w tych materiałach [26, 27, 28]. Skutkuje to szeregiem interesujących zastosowań monowarstw TMD ze względu na ich planarną naturę i właściwości półprzewodnikowe. Jednym z najbardziej znanych jest skalowalny układ kubitów zlokalizowanych w bramkowanych kropkach kwantowych (ang. quantum dots, QD) [29, 26], gdzie kubity są zdefiniowane na spinach lub dolinach elektronów uwięzionych w kolejnych QDs.

Rozważmy teraz różne opcje definiowania kubitów przedstawione na Rys. 2. Pionierski kubit spinowy Lossa-DiVincenzo [29] został przedstawiony na Rys. 1(a). Jego dolinowy odpowiednik, jak na Rys. 1(b), był rozważany w [30, 19, 1]. W przeciwieństwie do pierwszej z tych prac [30], w której przedstawiono ideę zdefiniowania kubitu na podstawie obsadzenia doliny przez nośnik w QD, w [1] zaproponowałem implementację, w której staraliśmy się odpowiedzieć na pytanie, jak efektywnie manipulować takim kubitem dolinowym za pomocą metod elektrycznych. W innym podejściu, przedstawionym na Rys. 1(c), został zdefiniowany tzw. kubit spinowo-dolinowy [31, 4]. W tych dwóch artykułach omówiono również alternatywne metody manipulowania izospinem dolinowym – przy użyciu defektów obecnych w strukturze [31], lub ostrego potencjału pochodzącego od końcówki STMa [4]. Wreszcie, hybrydowy układ dwóch kubitów wykorzystujacych spin i dolinę pojedynczego nośnika [32, 2] został przedstawiony na Rys.1(d).

TMD nie są jedynymi materiałami bazowymi jakie można wykorzysytać do implementacji kubitów dolinowych. Inne materiały posiadające wiele nierównoważnych dolin w paśmie elektronowym/dziurowym obejmują: nanorurki węglowe [33] lub krzemowe QDs [34].

Zaletą kubitów dolinowych może być również ich długi czas życia. W przypadku TMD główną trudnością jest uzyskanie próbek wolnych od defektów. Po osiągnięciu tego celu, głównym spodziewanym

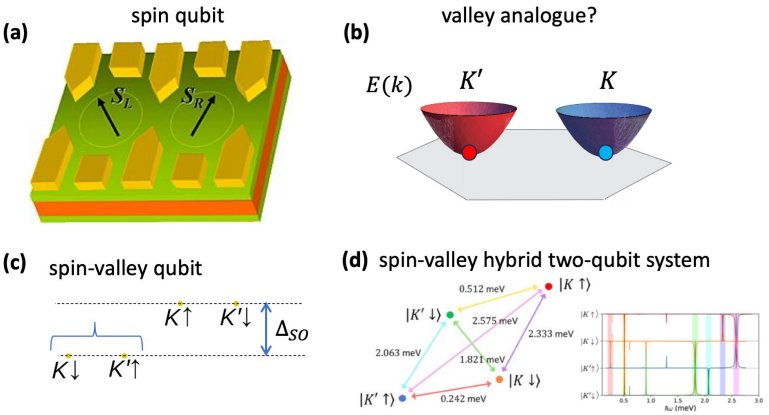

Figure 2. *Różne sposoby definiowania kubitów i układów sprzężonych dwóch kubitów za pomocą spinu i izospinu dolinowego obecnych w 2D TMD: (a) pionierski kubit spinowy zdefiniowany na spinie elektronu lub dziury uwięzionych w bramkowanej QD; (b) dolinowy (izospinowy) analog kubitu spinowego; (c) mieszany kubit spinowo-dolinowy zdefiniowany na najniższej parze Kramersa w podprzestrzeni spinowo-dolinowej; (d) hybrydowy układ dwóch kubitów złożony ze spinu i izospinu dolinowego elektronu (dziury). Rysunek (a) został zaadaptowany na podstawie [29].*

mechanizmem relaksacji (T_1) i defazowania (T_2) kubitów dolinowych będą fonony. W rzeczywistości nieznane są odpowiednie czasy życia w TMD, jednakże ostatnio zmierzono T_1 dla bramkowanych QD w dwuwarstwie grafenu (BLG). W [35] opisano czas relaksacji doliny pojedynczych cząstek przekraczający kilka mikrosekund ($T_1 > 5\,\mu$s) w elektrostatycznie zdefiniowanych BLG QDs. Głównym mechanizmem odpowiedzialnym za relaksację jest sprzężenie elektron-fonon. Co więcej, zmie-rzony czas relaksacji dla qubitu dolinowego typu singlet/tryplet przekracza 500 ms [36] ($T_1 > 500$ ms) i jest o ponad jeden rząd wielkości dłuższy niż dla kubitów spinowych.

Wróćmy do problemu wykonywania operacji na qubitach dolinowych. Jak można uzyskać operacje jednokubitowe czysto elektrycznie? Elementy macierzowe potencjału uwięzienia nie powinny zanikać dla stanów między dwiema dolinami K,K', reprezentowanymi przez współczynniki Blocha $\exp(\pm iK\mathbf{r})$. Oznacza to, że niezerowe elementy macierzowe będą dla potencjałów, które zmieniają się w skalach porównywalnych do wektora sieci krystalicznej. W TMD funkcja falowa (objętościowa) dla m-tego pasma (CB lub VB) dla każdego $\mathbf{k}$ jest liniową kombinacją funkcji Blocha na podsieciach l metalu przejściowego M i dimeru chalkogenów X_2:

$$|\psi^m_{\mathbf{k},\sigma}\rangle = \sum_l A^m_{\mathbf{k},\sigma,l} \left|\psi_{\mathbf{k},l}\right\rangle \otimes |\chi_\sigma\rangle\,, \tag{4.1}$$

gdzie $|\chi_\sigma\rangle$ jest spinorową częścią funkcji falowej, a $\left|\psi_{\mathbf{k},l}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{R}_l}^{N_c} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \varphi_l(\mathbf{r}-\mathbf{R}_l)$ są funkcjami Blocha zbudowanymi z orbitali atomowych φ_l (N_c jest liczbą komórek elementarnych): orbitali d dla M i orbitali p zlokalizowanych na dimerach X_2 [4, 6]. Funkcje falowe w krysztale bulk $A^{\mathrm{VB}}_{\mathbf{k},\sigma,l}$ można uzyskać przez diagonalizację Hamiltonianu ciasnego wiązania (TB) $H_{\mathrm{bulk}} + H_{\mathrm{SO}}$ dla każdego $\mathbf{k}$, razem z $H^{ll'}_{\mathrm{SO}} = \sum_a \frac{\lambda_a}{\hbar} \langle\varphi_l|\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}|\varphi_{l'}\rangle$, $a = \mathrm{M}, \mathrm{X}_2$ będącym wewnętrzną częścią oddziaływania SO [37]. Teraz, jeśli wprowadzimy zewnętrzny potencjał elektrostatyczny $V(\mathbf{r})$ do układu, odpowiednie elementy macierzowe, ubrane przez $A^{\mathrm{VB}}_{\mathbf{k},\sigma,l}$, uzyskują następującą postać [6]:

$$V^{mn}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \sum_\sigma \langle\psi^m_{\mathbf{k},\sigma}|V(\mathbf{r})|\psi^n_{\mathbf{k}',\sigma}\rangle = \sum_\sigma \sum_l A^{m,*}_{\mathbf{k},\sigma,l} A^n_{\mathbf{k}',\sigma,l} \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{R}_l}^{N_c} V(\mathbf{R}_l) e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_l}, \tag{4.2}$$

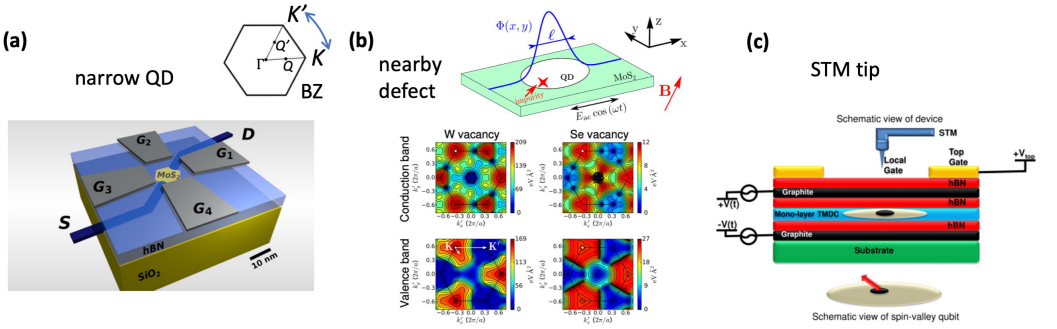

Figure 3. *Elektryczna manipulacja doliną przy użyciu fizycznej realizacji silnie zlokalizowanego potencjału elektrostatycznego: (a) w wąskiej bramkowanej QD, (b) indukowanego przez pobliski potencjał defektu, lub (c) końcówkę STMa. Rysunek (b) został zaadaptowany z [31] oraz [38].*

gdzie wykorzystujemy warunek ortogonalności $\langle\varphi_l|\varphi_{l'}\rangle = \delta_{l,l'}$. Kluczowym składnikiem elementów rozpraszających jest transformata Fouriera potencjału $V_l(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{1}{N_c}\sum_{R_l}^{N_c} V(\mathbf{R}_l)e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_l}$. Teraz staje się jasne, że aby uzyskać niezerowe elementy macierzowe między różnymi dolinami, tj. $\mathbf{k} = K$ oraz $\mathbf{k}' = K'$, musimy zastosować potencjały elektrostatyczne, które zmieniają się na skali długości rzędu $\frac{2\pi}{|K'-K|}$, porównywalną ze stałą sieciową a (zwróćmy uwagę na położenie punktu $K = (\frac{4\pi}{3a}, 0)$ w BZ).

Zaproponowaliśmy dwa układy przedstawione na Rys. 3(a,c), aby spełnić ten wymóg. Jeden, poprzez lokalne bramkowanie [1], ale uzyskanie tak małej rozdzielczości przestrzennej zastosowanych bramek może być wyzwaniem przy użyciu obecnych technologii. Drugi, łatwiejszy do wdrożenia, obejmuje użycie końcówki STM [4]. Pojawiły się również propozycje sugerujące wykorzystanie defektów punktowych [31], jak opisano na Rys. 3(b), gdzie np. wakancje metalu M mogą sprzęgać obie doliny w CB [38]. Oprócz tych propozycji, w sekcji 4.2 omawiam jeszcze jedną realizację obejmującą heterostruktury boczne, którą zaproponowałem w [6].

Wszystkie przedstawione przez nas rozwiązania opierają się na bramkowaniu elektrostatycznym: elektrycznie zdefiniowanych QD i drutach, które więzią pojedyncze elektrony lub dziury. A co z eksperymentalną realizacją struktur zawierających (bramkowane) QD w materiałach 2D? Chociaż koncepcja kubitu dolinowego lub qubitu spinowo-dolinowego w TMD istnieje już od kilku lat, wciąż czekamy na jej eksperymentalną realizację.

Pojawiają się prace nad elektrostatycznie sterowanymi QD w monowarstwie MoS_2 [39], monowarstwie [40] lub dwuwarstwie [41] WSe_2, lub nawet ze stanami QD w przerwie, zlokalizowanymi na defektach w MoS_2 [42]. Pomimo tych znaczących postępów w inżynierii urządzeń 2D, wyizolowanie i zaadresowanie poszczególnych stanów spinowych lub dolinowych w reżimie pojedynczych elektronów pozostaje jednak wyzwaniem. Częściowo wyzwanie to wynika z istnienia słabo ekranowanych potencjałów od zaburzeń pojawiajacych się przy ekstremalnie niskiej gęstości nośników, i dużej masie efektywnej elektronów/dziur [19]. Wymaga to wąskich potecjałów uwięzienia zredukowanych do kilkudziesięciu czy nawet kilkunastu nanometrów. Architektury urządzeń stosowane do tej pory dla QD w TMD mają trudności z osiągnięciem tak małych kropek. Dlatego w pracy [8] zaproponowałem alternatywne podejście do architektury opartej na bramkowanych monowarstwach TMD. Proponowana wielowarstwowa struktura pozwala uzyskać wąską QD o stosunkowo dużej kwantyzacji przestrzennej. Przedstawiam tam dokładny zestaw optymalnych wymiarów urządzenia i grubości dielektryków, oraz wyznaczam zależność kwantyzacji QD od jego geometrii. Architektura urządzenia została zamodelowana w realistyczny sposób za pomocą samozgodnych obliczeń Poissona-Schrödingera. Co ważne, wszystkie parametry i wymiary urządzenia użyte w modelowaniu są osiągalne eksperymentalnie.

* * *

Informatyka kwantowa to dziedzina, która łączy mechanikę kwantową z teorią informacji, zapewniając ramy do przetwarzania i przesyłania danych w sposób, którego nie mogą osiągnąć systemy klasyczne. Sercem tej dziedziny jest koncepcja kubitu, kwantowego odpowiednika klasycznego bitu, który jest podstawową jednostką informacji kwantowej. Aby zaimplementować kubit, potrzebny jest dobrze zdefiniowany dwustanowy system kwantowy. Charakterystyczną cechą kubitu, w przeciwieństwie do klasycznego bitu, jest jego zdolność do istnienia w superpozycji obu stanów bazowych jednocześnie. Jednak superpozycja pojedynczego kubitu byłaby mało użyteczna, a dopiero superpozycja stanów rejestru wielu kubitów daje przewagę nad systemem klasycznym. Oznacza to, że podczas gdy klasyczny komputer przetwarza jedną kombinację bitów na raz, komputer kwantowy (ang. quantum computer, QC) może przetwarzać wiele kombinacji jednocześnie ze względu na superpozycję kubitów. Dla systemu z N kubitami oznacza to, że QC może reprezentować 2^N możliwych stanów jednocześnie, pozwalając na formę obliczeń równoległych, której klasyczne systemy nie mogą dorównać.

Inną kluczową właściwością oprócz superpozycji kwantowej jest splątanie kwantowe, rodzaj korelacji między kubitami, który nie ma klasycznego odpowiednika. Stan splątany oznacza stan, który jest globalnie lepiej zdefiniowany niż lokalnie i w tym sensie nielokalny (w przypadku splątania dwuczęściowego (bipartite) nielokalność jest równoważna splątaniu). Splątanie jest kluczowe, aby algorytmy kwantowe mogły osiągnąć wykładnicze przyspieszenie w stosunku do klasycznych odpowiedników [43], a także do teleportacji kwantowej lub uzyskania kwantowych kodów korekcji błędów [44].

Aby QC było wykonalne, musi spełniać zestaw podstawowych kryteriów znanych jako kryteria DiVincenzo [45], które określają wymagania dotyczące wdrażania systemów QC. Oprócz naturalnych wymagań, takich jak zdolność do inicjalizacji systemu w znanym stanie lub długiego czasu koherencji (oba $T_1 > T_2$), system musi być skalowalny, tj. mieć możliwość rozszerzenia na dużą liczbę kubitów. To prowadzi nas do kolejnego kryterium, implementacja musi obejmować uniwersalny zestaw bramek kwantowych, co oznacza, że nie tylko musimy umieścić wiele (tysiące) kubitów w jednym obwodzie, ale musimy je zaaranżować tak, aby oddziaływały ze sobą. Na szczęście wystarczy, że sąsiednie kubity będą ze sobą oddziaływać – czyli musimy mieć zaimplementowane bramki (operacje unitarne) wprowadzające nietrywialne operacje pomiędzy sąsiednimi kubitami. Nietrywialne, czyli takie, które mogą wprowadzać splątanie, np. CNOT lub $\sqrt{\text{SWAP}}$.

Zbiór bramek niezbędnych do aproksymacji dowolnej (unitarnej) operacji – algorytmu kwantowego jest tak zwanym uniwersalnym zbiorem bramek kwantowych [46]. Uniwersalny zbiór bramek kwantowych jest wystarczający do wykonania dowolnego obliczenia (algorytmu) kwantowego. Najpopularniejszy uniwersalny zestaw obejmuje bramkę Hadamarda, bramkę Pauliego-X i bramkę kontrolowanej negacji (CNOT). Bramki te, po odpiednim połączeniu, mogą aproksymowac dowolny algorytm kwantowy.

Ostatnim kryterium, które musi spełniać implementacja QC, jest możliwość odczytu stanu kubitów po wykonaniu zestawu operacji (obliczeń). Zazwyczaj w układach spinowych (a także w propozycjach dolinowych), zarówno do inicjalizacji, jak i do odczytu, można zastosować tzw. blokadę Pauliego.

Obecnie wiodącą implementacją komputerów kwantowych są kubity nadprzewodzące. Technologia ta jest rozwijana przez firmy takie jak Google, IBM i Rigetti. Firma Google w 2019 roku ogłosiła przełom w obliczeniach kwantowych, wprowadzając komputer kwantowy Sycamore, oparty na kubitach nadprzewodzących, który osiągnął tzw. supremację kwantową [47], wykonując obliczenia, które byłyby niezwykle trudne (niemożliwe?) dla klasycznego komputera.

Chociaż obecne procesory kwantowe oparte na kubitach nadprzewodzących zawierają już setki kubitów, wierność obecnych kubitów jest bardzo daleka od ideału: w praktyce oznacza to, że aby uzyskać pojedynczy logiczny kubit o akceptowalnej wierności, musimy użyć zazwyczaj 10^3-10^4 (obecnie dostępnych) kubitów fizycznych, aby można było zastosować algorytmy korekcji błędów. Istnieje szansa, że kubity na kropkach kwantowych (spinowych lub dolinowych) będą mieć znacznie lepszą wierność [48], niż ich nadprzewodnikowe odpowiedniki. Dlatego wciąż nie jest jasne, która technologia doprowadzi do użytecznego QC, a może będzie to wiele róznych technologii?

Wśród skalowalnych prób implementacji QC w ciele stałym, kubity na spinach elektronowych uwięzionych w elektrostatycznych QD są obiecujące [29, 49], ponieważ są łatwe do skalowania (podobnie jak dzisiejsze układy scalone o dużej skali integracji). Również spiny uwięzione w atomowo cienkich półprzewodnikach są aktywnie badane jako nośniki informacji kwantowej [26]. W ten sam sposób, elektrycznie sterowane kubity dolinowe [27, 50] mogą być również obiecującą technologią dla budowy skalowalnego QC.

4.2. Kubit dolinowy i jego implementacja w materiałach 2D

Osiągnięcia opisane w tej sekcji zostały opracowane na podstawie prac [1, 4, 6].

Ogólna idea implementacji qubitu na dolinowym stopniu swobody została zasugerowana w [30]. Jednak w osiągnięciu opisanym w tej sekcji zaproponowałem implementację kubitów dolinowych w materiałach 2D, takich jak TMD, wraz z wydajną metodą manipulowania nimi przy użyciu wyłącznie metod elektrycznych, co ułatwi przyszłe skalowanie takich kubitów do pełnowymiarowego QC. W tej sekcji skupimy się na wykonywaniu operacji na pojedynczym kubicie, tj. kontrolowaniu sprzężenia dwóch dolin za pomocą potencjałów elektrostatycznych i pól elektrycznych. W pracach [1, 4, 6] zaproponowałem różne fizyczne realizacje dla sprzęgania stanów kubitu dolinowego (dolin). W podobnym czasie zaproponowano wykorzystanie do tego celu defektów [31], ale wiadomo, że defekty są znacznie trudniejsze do kontrolowania, co utrudniałoby proces wytwarzania takich struktur w praktyce.

Wąska bramkowana QD. Struktura bramkowana przedstawiona na Rys. 3(a) i wprowadzona w [1] umożliwia sprzężenie obu dolin, a tym samym indukowanie przejść międzydolinowych. Kluczowym czynnikiem jest to, że założony rozmiar przestrzenny uwięzienia σ_{QD} definiującego QD jest tutaj bardzo mały, rzędu 1-2 nm, co jest znacznie poniżej rozmiarów aktualnie wytwarzanych bramkowanych QD. Jednakże wydaje się, że rozmiary te – przynajmniej w założeniu – mogłyby być zmniejszone, gdyż obecnie osiągalna rozdzielczość litografii wiązką elektronową pozwala wytwarzać obiekty o rozmiarach nawet kilku nanometrów [51].

Sprzężenie stanu elektronu z tak ciasnym, elektrostatycznie zdefiniowanym potencjałem, pozwala na uzyskanie elektrycznie kontrolowanego przejścia międzydolinowego. Przyjmuje ono postać oscylacji Rabbiego, gdzie częstotliwość modulacji potencjału uwięzienia jest dostrojona do różnicy energii między dwoma stanami dolinowymi K i K' (dla danego spinu), równej Δ_{SO} – jak przedstawiono na Rys. 2(c). Modulacje te wprowadzają asymetrię w potencjale, powodując oscylacyjne ściskanie gęstości elektronowej. Uzyskane czasy przejścia są rozsądne – rzędu setek ps.

Wyzwanie związane z tą propozycją polega na tym, że typowe techniki litograficzne, w połączeniu z dodlatkowym rozmyciem uwięzienia z powodu rozseparowania przestrzennego bramki od monowarstwy TMD przez warstwy tunelujące, ograniczają rozmiar osiąganych QDs do około kilkunastu nanometrów. Jednakże, jak wspomniano powyżej, zastosowanie odpowiedniej litografii elektronowej może pomóc w dalszym zmniejszeniu rozmiaru QD. Co więcej, w [8] zaproponowałem urządzenie o innej architekturze: odmiennej konfiguracji warstw i dodatkowych *split gates* poniżej monowarstwy, co w powinno pozwolić na uzyskiwanie silniej zlokalizowanych uwięzień. Koncepcja ta oczekuje obecnie na weryfikację eksperymentalną.

W pracy [1] zastosowano model TB w przestrzeni rzeczywistej, dlatego widmo (pokazane na Rys. 3 w [1]) zawiera stany brzegowe zlokalizowane w przerwie energetycznej. Podczas budowania modelu kubitu ważne było wykluczenie możliwego wpływu stanów brzegowych, dlatego założona monowarstwa, w postaci heksagonalnego płatka, była znacznie większa niż rozmiar uwięzienia. Aby upewnić się, że uzyskany efekt nie jest rezonansem ze stanami w przerwie, w pracy [2] wykonano obliczenia sprzężenia międzydolinowego w funkcji rozmiaru płatka (Rys. 7 w [2]), obserwując, że powyżej pewnego rozmiaru płatka sprzężenie nasyca się, jest stabilne, i nie zależy od rozmiaru monowarstwy.

W artykule [1] pokazano także jak zaimplementować operacje NOT na pojedynczym kubicie dolinowym oraz jednokubitową bramkę Hadamarda. Omówiono również możliwość odczytu kubitu dolinowego, ale bez dokładnego modelowania takiego procesu.

W pracy [1] opracowano również model numeryczny łączący równanie Schrödingera dla elektronu uwięzionego w QD, w formalizmie 3-pasmowego hamiltonianu TB H_{tb} dla MoS_2 [16]:

$$[H_{\text{tb}} + \phi(\mathbf{r})]\,\psi_m(\mathbf{r}) = E_m\psi_m(\mathbf{r}), \tag{4.3}$$

wraz z uogólnionym równaniem Poissona dla potencjału QD $\phi(\mathbf{r})$, biorąc pod uwagę realistyczną strukturę modelowanego nanourządzenia. W pracy tej dokładnie modelujemy potencjał wewnątrz nanourządzenia, uwzględniając odpowiednie warunki brzegowe na bramkach i zależną od przestrzeni przenikalność materiałów, rozwiązując uogólnione równanie Poissona z niejednorodną, zależną od przestrzeni przenikalnością $\varepsilon(\mathbf{r})$ różnych materiałów struktury.

W następnym kroku, wykorzystując zidentyfikowaną bazę stanów własnych QD $\psi_m(\mathbf{r})$ można obliczyć dokładną ewolucję czasową układu $\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(\mathbf{r})e^{-iE_nt/\hbar}$ dla Hamiltonianu zależnego od czasu (warto pamiętać, że nie jest to tylko przybliżone podejście perturbacyjne):

$$i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r},t) = H(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t), \tag{4.4}$$

z $H(\mathbf{r},t) = H_{\text{tb}} + \phi(\mathbf{r},t)$. Wynika z tego, że pełna energia potencjalna zależna od czasu $\phi(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r}) + \delta\phi(\mathbf{r},t)$ zawiera część oscylującą $\delta\phi(\mathbf{r},t)$, która jest generowana przez modulację napięć na bramkach sterujących. Wstawienie powyższej definicji $\Psi(\mathbf{r},t)$ do Eq. 4.4, i zdyskretyzowanie w czasie, daje iteracyjną procedurę dla $c_n(t)$, która zależy tylko od elementów macierzowych $\langle\psi_m|\delta\phi(\mathbf{r},t)|\psi_n\rangle$. W ten sposób obliczenia dokładnie oddają oscylacje potencjału przyłożonego do bramek, wymuszając modulację uwięzienia. W obliczeniach zależnych od czasu w każdym kroku czasowym potencjał uwięzienia był aktualizowany ze względu na zmieniające się napięcia bramki i zależny od czasu rozkład ładunku elektronowego $\rho(\mathbf{r},t)$, przy użyciu uogólnionego równania Poissona:

$$\nabla\cdot\left[\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})\nabla\phi^t(\mathbf{r},t)\right] = |e|\rho(\mathbf{r},t). \tag{4.5}$$

Od całkowitego potencjału elektrostatycznego $\phi^t(\mathbf{r},t)$ odejmujemy samooddziaływanie elektronu:

$$\phi^e(\mathbf{r},t) = \frac{-|e|}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\text{mono}}}\int d^2r'\frac{\rho(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \tag{4.6}$$

i uzyskując w ten sposób potencjał uwięzienia $\phi(\mathbf{r},t) = \phi^t(\mathbf{r},t) - \phi^e(\mathbf{r},t)$, który wchodzi do równania Schrödingera. W Eq. 4.6 zakłada się stałą dielektryczną $\varepsilon_{\text{mono}}$ monowarstwy, gdzie zlokalizowany jest elektron. Potencjał uwięzienia $\varphi(\mathbf{r},t)$ uwzględnia ładunek indukowany (w odpowiedzi na pojawienie się zlokalizowanych elektronów w układzie), a tym samym uwzględnia efekt samoogniskowania elektronów. Z drugiej strony, $\rho(\mathbf{r},t)$ zależy od aktualnego rozkładu funkcji falowej $\Psi(\mathbf{r},t)$ w danym momencie, stąd równania Poissona i Schrödingera muszą być rozwiązywane w sposób samozgodny. Realistyczne, samozgodne obliczenia TB Poissona-Schrödingera zostały następnie w [1] uzupełnione symulacjami w ramach efektywnego modelu ciągłego (przyblizenie masy elektywnej).

Sprzężenie hamiltonianu TB z zależnym od czasu równaniem Schrödingera nie było oryginalnym pomysłem. Tego typu obliczenia były już przeprowadzane wcześniej, np. dla nanorurek węglowych [52]. W opracowanym tutaj modelu, hamiltonian TB dał bazę, w której opisano ewolucję, ale podczas ewolucji potencjał był wyznaczany na każdym kroku w sposób samozgodny z aktualnym rozkładem ładunku. Innymi słowy, potencjał był nie tylko funkcją napięcia bramek i czasu, ale także aktualnego rozkładu ładunku elektronu w monowarstwie, co sprawiło, że obliczenia były realistyczne. Takie rozszerzenie symulacji czasowej hamiltonianu TB poprzez sprzężenie jej z rownaniem Poissona stanowi oryginalny wkład do rozwoju tego typu metod. Uwzględnienie efektu ekranowania elektronu i wkładu od ładunków indukowanych do potencjału uwięzienia jest istotne w badanych nanostrukturach, ponieważ w materiałach 2D bramki są prawie w bezpośrednim kontakcie z nośnikiem (warstwy tunelowe są bardzo cienkie), a uwięzienie ze względu na duże masy efektywne jest znacznie ciaśniejsze (niż np. w popularnych heterostrukturach III-V, takich jak $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$), a ładunek elektronu jest bardziej

zlokalizowany w bezpośrednim sąsiedztwie bramek. W typowych solwerach Poissona-Schrödingera, takich jak *nextnano* [53], takie efekty są pomijane.

Kubit spinowo-dolinowy. Charakterystyczną cechą podejścia zaproponowanego w [1] było to, że stany bazowe kubitu zdefiniowane na dwóch stanach dolinowych (w danej podprzestrzeni spinowej) są oddzielone od siebie energetycznie w wyniku sprzężenia SO Δ_{SO}. Zazwyczaj dla TMD osiąga ono wartość kilku meV, np. dla MoS_2 jest to około 3 meV. W związku z tym, podczas wymuszania przejść międzydolinowych, częstotliwość pompowania (składowa oscylacyjna napięć na bramkach) wynosi setki GHz, co może stanowić wyzwanie dla istniejących technik eksperymentalnych. Rozszczepienie to można zmniejszyć dobierając odpowiednie pole magnetyczne. Niemniej jednak, w artykule [4] zaproponowaliśmy nieco inne podejście, w którym kubit jest zdefiniowany w mieszanej podprzestrzeni spinowo-dolinowej na parze stanów: $|K\downarrow\rangle$ and $|K'\uparrow\rangle$. Jak zaznaczono na Rys. 2(c), blokada spinowo-dolinowa pojawiająca się w wyniku sprzężenia SO skutkuje dwoma zdegenerowanymi stanami, jeden ze stanów kubitu o spinie zwróconym w dół zlokalizowany w dolinie K strefy Brillouina, a drugi stan zlokalizowany w dolinie K' ze spinem do góry. Podobnie jak poprzednio, również tutaj elektron jest uwięziony w QD – kubit musi być gdzieś zlokalizowany (ograniczony przestrzennie), aby kontrolować jego oddziaływanie z sąsiednimi kubitami (zaimplementować bramki dwu-kubitowe). Warto zauważyć, że w przeciwieństwie do kubitu zdefiniowanego na stanach doliny w danej podprzestrzeni spinowej, teraz w celu wykonania operacji na kubicie konieczne jest obrócenie spinu równocześnie z przejściem międzydolinowyym. W [4] opisujemy operacje kubitowe niezbędne do obrócenia kubitu spinowo-dolinowego jako kombinację zastosowanego pola elektrycznego, umożliwiającego sprzężenie spin-orbita typu Rashba w pojedynczej dolinie, z bocznym silnie zlokalizowanym potencjałem mieszającym doliny. Sprzężenie Rashby wymaga zastosowania prostopadłego pola elektrycznego, które łamie symetrię odbicia względem płaszczyzny monowarstwy. Sprzężenie Rashby w TMD zostało również przeanalizowane w pracy [2], która zostanie omówiona w sekcji 4.3.

Z punktu widzenia modelowania, w [4] (ale także w [5] oraz [7]) stany kubitów zostały dokładnie opisane za pomocą modelu TB opisującą całą strukturę nanourządzenia obejmujacą płatek monowarstwy o rozmiarach milonów atomów. Model TB został rozwinięty w przestrzeni wektora falowego. Przejście do przestrzeni k było korzystne, ponieważ daje możliwość obcięcia bazy tylko do obszarów w pobliżu minimum CB (tj. punktów K, K'), co umożliwia modelowanie znacznie większych układów niż byłoby to możliwe dla standardowego hamiltonianu TB w przestrzeni rzeczywistej, który był wykorzystywany w pracy [1] (ale także w [2, 3, 6]).

In [4] zaproponowałem również, że ostry potencjał, przynajmniej w warunkach eksperymentalnych, może być realizowany za pomocą końcówki STMa, jak pokazano na Rys. 3(c). Należy jednak zauważyć, że rozwiązanie to nie zapewnia prostej skalowalności do większych systemów. Z kolei w [31] omówiono możliwość zdefiniowania kubitu spinowo-dolinowego na stanach QD z pobliskim defektem, jak pokazano na Rys. 3(b), ale ta implementacja ma wadę w porównaniu z potencjałami indukowanymi elektrostatycznie, ze względu na trudności z kontrolowalnym umieszczaniem/lokalizacją defektów w próbce.

Heterostruktura planarna (boczna). W przypadku grafenu wiadomo, że najniższy stan propagujący się we wstędze na krawędzi typu 'armchair' jest zbudowany ze stanów w obu dolinach, ale dla krawędzi 'zygzak' tylko jedna dolina ma swój wkład [54]. Dlatego w kolejnej pracy [6] zaproponowałem nieco inne podejście do mechanizmu indukującego przejścia międzydolinowe, wykorzystując planarne heterostruktury między dwoma materiałami TMD, ze złączem zorientowanym wzdłuż kierunku typu 'armchair', jak pokazano na Rys. 4. Boczne heterostruktury TMD zostały z powodzeniem zsyntetyzowane i są przedmiotem obecnych badań [55]. Należy jednak zauważyć, że chociaż możliwe jest syntetyzowanie takich heterostruktur bocznych, nie można ich wytworzyć przy pomocy eksfoliacji, ale muszą być one hodowane epitaksjalnie, co skutkuje niższą ich jakością niż mają kryształy eksfoliowane.

Jeśli wytworzymy heterozłącze planarne poprzez połączenie dwóch materiałów TMD, np. MoS_2 i WS_2 jak na Rys. 4(a), uzyskamy profil złącza, przedstawiony na Rys. 4(c), który posiada ułożenie pasm typu II z charakterystyznym offsetem CB, ale także z ładunkami przestrzennymi, które gromadzą się

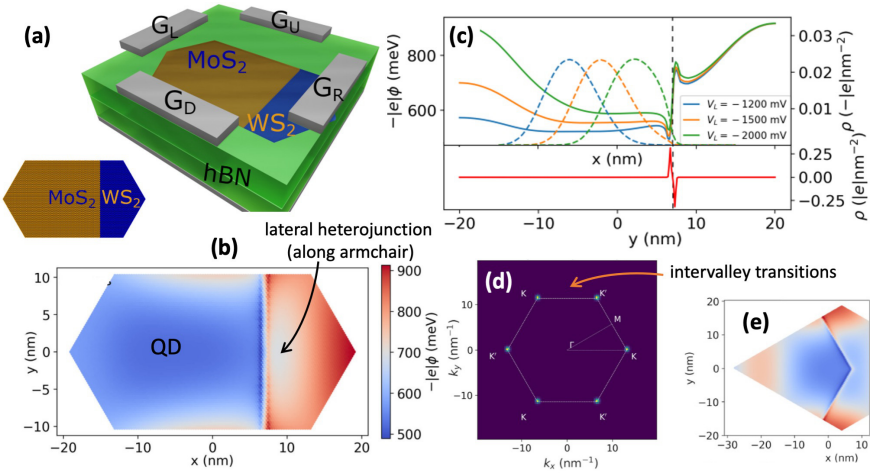

Figure 4. *Kubit dolinowy oparty na planarnej (bocznej) heterostrukturze dwóch TMDs: (a) nanostruktura zawierająca bramkowany płatek powstały z połaczenia dwóch TMD (MoS_2 i WS_2) połączonych bocznie wzdłuż krawędzi typu 'armchair', w którym tworzy się powierzchnia potencjału (b), złożona z QD, która ogranicza pojedynczy elektron oraz potencjał skokowy wzdłuż złącza, pochodzący od ładunku przestrzennego indukowanego na złączu (c). Wymuszenie elektronu do oddziaływania z ostrym potencjałem na złączu indukuje przejścia międzydolinowe (d). Oddziaływanie z dwoma różnymi krawędziami typu armchair (e) może prowadzić do akumulacji dolinowej fazy Berry'ego.*

tworząc dipol elektrostatyczny na złączu. Złącze można skutecznie modelować jako liniowy potencjał dipolowy, który w pracy [6] modelujemy realistycznie w oparciu o szczegóły rozkładu ładunku przestrzennego dla heterostruktur TMD (transfer ładunku przez interfejs), uzyskane w obliczeniach DFT [56, 57]. Jeżeli teraz uwięzimy elektron w QD zdefiniowanym po jednej stronie złącza, a następnie przesuniemy go blisko złącza, aby oddziaływał z barierą – wszystko przedstawione na Rys. 4(b), to możemy zaobserwować przejścia międzydolinowe – przedstawione na Rys. 4(d).

Co ważne, w taki sposób uzyskamy przejścia międzydolinowe tylko dla interfejsu wzdłóż kierunku 'armchair' między materiałami, co wynika z faktu, że transformata Fouriera występująca w elementach macierzowych opisujących przejście międzydolinowe (por. z Eq. 4.2) potencjału wydłużonego w przestrzeni rzeczywistej (wzdłóż sciany złącza) jest ortogonalna w przestrzeni k. Czyli dla złącza $V_J(\mathbf{r})$ wzdłuż 'armchair', nieznikające elementy macieżowe $\langle K|V_J|K'\rangle$ łączą obydwie doliny. Zostało to też zobrazowane, ale dla nieco innej struktury, na Rys. 8(d) oraz (e). Z kolei złącze zorientowane w kierunku 'zygzak' nie mieszałoby dolin. Przejścia te mają charakter rezonansowy i prowadzą do oscylacji Rabiego z okresem przejścia zależnym od stopnia nakładania się gęstości elektronu na obszar złącza.

Ponadto, jak przeanalizowaliśmy w [6], pewna dodatkowa faza izospinu dolinowego pojawia się dla działania różnych kierunków 'armchair'. Dlatego też, jeśli zorganizujemy dwa materiały z połączeniem w kształcie rombu z krawędziami wzdłóż dwóch róznych kierunków 'armchair', możemy uzyskać dwa niekumutujące ze sobą obroty kubitu dolinowego. Możliwość dwóch nieprzemiennych rotacji izospinów dolinowych poprzez oddziaływanie z dwoma różnymi krawędziami armchair zmotywowała nas do zbadania możliwości manipulacji kubitami dolinowymi za pomocą tzw. fazy geometrycznej. Faza Berry'ego [58] naturalnie pojawia się w niezdegenerowanych stanach kwantowych podczas cyklicznej, adiabatycznej manipulacji elektronem. Można ją również uogólnić na układy zdegenerowane [59], prowadząc do tak zwanej nieabelowej fazy geometrycznej w podprzestrzeni degeneracji. Taka niekomutatywność macierzy rotacji spinów, związana z adiabatyczną manipulacją spinem elektronu, gdy porusza się on po zamkniętej ścieżce, prowadzi do efektywnego schematu manipulacji spinem [60, 61]. Schemat ten wykorzystuje sprzężenie spin-orbita, obecne w materiałach TMD lub III-V, i nie wymaga żadnego zewnętrznego pola magnetycznego (degeneracja TRS). W [6] zweryfikowaliśmy, że elementy

macierzowe opisujące przejścia międzydolinowe dla różnych kątów orientacji złącza, mogą byc interpretowane jako operatory $T_{\frac{\pi}{6}} = \frac{\eta}{2}(\tau_x - \tau_y)$ oraz $T_{\frac{\pi}{2}} = \frac{\eta}{2}(\tau_x + \tau_y)$ działające na podprzestrzeni izospinu dolinowego z pewnym parametrem η, przy czym τ_i są macierzami Pauliego w tej przestrzeni. Ponieważ te dwa operatory obrotu nie komutują, $[T_{\frac{\pi}{6}}, T_{\frac{\pi}{2}}] = \eta^2 i\tau_z \neq 0$, przypuszczamy, że przy odpowiednim rozmieszczeniu złącza, w naszym układzie może pojawić się niezerowa faza geometryczna, prowadząca do efektywnej manipulacji doliną, poprzez *dolinową fazę geometryczną*. W tym celu zaproponowałem, jak przedstawiono na Rys. 4(e), boczne złącze utworzone wzdłuż skrzyżowania dwóch kierunków 'armchair', dające w rezultacie złącze w kształcie narożnika. Poprzez odpowiednie zaprojektowanie złącza narożnego i ostrożne manipulowanie elektronem, aby poruszał się wzdłuż zamkniętej pętli blisko obydwu krawędzi złącza narożnego, indukując w ten sposób dwa niekomutujące obroty doliny, możliwe było zgromadzenie nieabelowej fazy geometrycznej, a tym samym efektywne obrócenie doliny. Wynik ten otwiera również możliwość uzyskania sprzężenia 'dolina-orbita', analogicznego do sprzężenia SO, ale zostawmy tę dyskusję do przyszłych badań.

4.3. Spinowo-dolinowe i czysto dolinowe układy dwóch kubitów

Osiągnięcia opisane w tej sekcji zostały opracowane na podstawie prac [2, 3].

Budowa uniwersalnego QC nakazuje, aby oprócz implementacji operacji jednokubitowych, zaimplementować (jakąś) nietrywialną operację dwukubitową, tj. taką, która może splątać dwa kubity. Dlatego musimy być w stanie sprzężyć dwa kubity i pozwolić im na interakcję. W tej sekcji omówię, w jaki sposób uzyskać sprzężenie między kubitami w dwóch konfiguracjach: dla układu kubitów spinowo-dolinowych opartego na spinie i izospinie dolinowym pojedynczego elektronu zamkniętego w QD oraz dla układu o dwóch izospinach dolinowych zdefiniowanego na parze elektronów zamkniętych w podwójnej QD.

Hybrydowy **spinowo-dolinowy układ dwukubitowy** został wprowadzony w [2]. Rozważając zarówno spinowe jak i dolinowe stopnie swobody, cztery stany bazowe są tworzone jako iloczyn (dwóch podprzestrzeni: spinu i doliny), jak pokazano na Rys. 2(d). Te cztery stany mogą rozpinać przestrzeń dwóch kubitów. Aby to osiągnąć, konieczna jest umiejętność wykonywania operacji niezależnie na każdym kubicie z osobna i nietrywialna bramka dwukubitowa, jak wspomniano powyżej.

Przeanalizujmy konfigurację zaproponowaną przeze mnie w [2]. Przykładając napięcia sterujące do bramek urządzenia, modulujemy potencjał uwięzienia i wymuszamy przejścia międzydolinowe. Obecne sprzężenie spin-orbita Rashby, z dokładną formą TB wyprowadzoną także w tej pracy, dodatkowo pozwala na operacje na spinie. Co więcej, włączenie obu efektów w tym samym czasie daje operację SWAP spin-dolina. W podejściu omówionym w [2], implementacja dwóch kubitów *w tym samym miejscu*, w oparciu o właściwości pojedynczego elektronu, prowadzi do intrygującej cechy, że bramki dwukubitowe są łatwiejsze do zrealizowania niż bramki jednokubitowe.

Pole elektryczne prostopadłe do powierzchni monowarstwy łamie symetrię odbicia σ_h i modyfikuje energie atomów w trzech podwarstwach MoS_2. Prowadzi to do zewnętrznego elektrycznie kontrolowanego oddziaływania SO typu Rashby. W pracy [2] opracowałem dokładną postać wyrazu Rashby w podejściu TB, w którym parametr hoppingu staje się zależny od spinu. W wyprowadzeniu uwzględniamy również orbitale p górnych (top) i dolnych (bottom) warstw siarki, do których przykładamy potencjały lokalne $V_{\text{top}} = E_z d/2$ and $V_{\text{bottom}} = -E_z d/2$ (gdzie d jest grubością monowarstwy), indukowane przez prostopadłe pole elektryczne $\mathbf{E} = E_z\hat{\mathbf{z}}$. W następnym kroku, biorąc pod uwagę taki rozszerzony (11-orbitalowy) model ciasnego wiązania, wykonujemy procedurę downfoldingu, wykorzystując technikę Löwdina, do podprzestrzeni orbitali Mo i otrzymujemy sprzężenie Rashby $\gamma_R^{\alpha\beta}$ (macierz) w bazie 3-orbitalowej: $\alpha, \beta = 1, 2, 3$. Ostatecznie otrzymujemy hamiltonian TB Rashby z charakterystycznym przeskokiem zależnym od spinu i kierunku $\hat{\mathbf{e}}_{ij}$ między dwoma najbliższymi metalami $\langle ij\rangle$:

$$H_R = \sum_{\langle ij\rangle \alpha\beta\sigma\sigma'} -i|e|E_z \gamma_R^{\alpha\beta}(\hat{\mathbf{e}}_{ij} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot \mathbf{s}_{\sigma\sigma'} c^{\dagger}_{i\alpha\sigma} c_{j\beta\sigma'}. \tag{4.7}$$

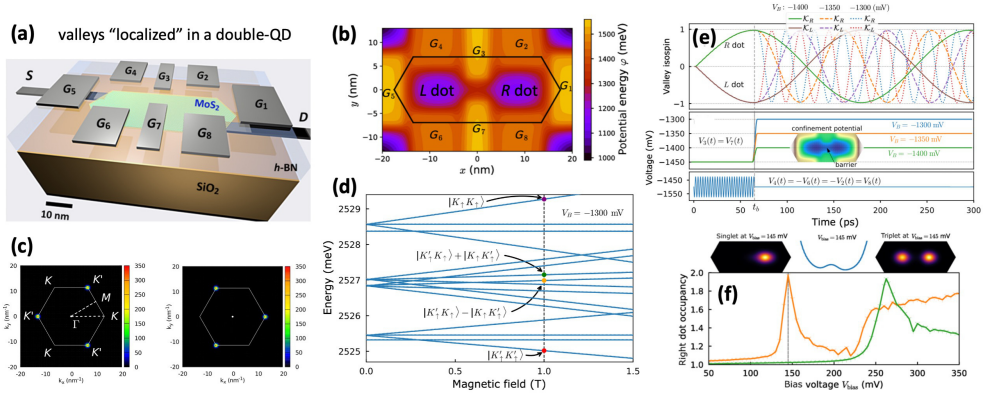

Figure 5. *Dwa kubity dolinowe zlokalizowane w bramkowanej podwójnej strukturze QD, gdzie (a) osiem lokalnych bramek $G_{1..8}$ tworzy krajobraz podwójnej studni potencjału (b) z wysokością bariery tunelowej między kropkami kontrolowaną przez parę bramek G_3 i G_7. Wypełnienie podwójnej QD przez dwa elektrony i kontrolowanie oddziaływań między kropkami pozwala nam zdefiniować dwa kubity dolinowe (znajdujące się w lewej kropce L i prawej kropce R) z operacjami jednokubitowymi (c) wykonywanymi na każdym kubicie osobno; oraz operacje dwukubitowe wykonywane na stanach dwuelektronowych (d) jako wymiana dolinowa między dwiema kropkami (e). Inicjalizacja i odczyt kubitów są również zaimplementowane w strukturze poprzez dolinową blokadę Pauliego (f).*

Uzyskany w ten sposób współczynnik Rashby $\gamma_R^{\alpha\beta}$ odpowiada wartości sprzężenia Rashby uzyskanej w ramach teorii $k \cdot p$ [19]. Włączyliśmy również pole magnetyczne do modelu poprzez dodanie standardowego członu Zeemana, ale także jako uwzględnienie efektów orbitalnych poprzez tzw. podstawienie Peierlsa dające dodatkowy czynnik w parametrze hoppingu w modelu TB w przestrzeni rzeczywistej. Ponadto oszacowane tutaj efektywne czynniki g (spinowy i dolinowy oddzielnie), które uwzględniają silne uwięzienie elektronów w QD, dobrze odpowiadają tym zmierzonym eksperymentalnie, jak opisano w [42].

Wreszcie, w pracy [2] pokazałem, wybierając i symulując różne przejścia, jak zaimplementować kontrolowaną bramkę dwukubitową, w której dolina kontroluje negację spinu: $C_{\mathcal{K}}NOT_s$ i odwrotnie: $C_sNOT_{\mathcal{K}}$, spełniając kryterium uniwersalności. Bramki dwukubitowe są tutaj łatwe do zaimplementowania, ponieważ oba kubity są określone na dwóch stopniach swobody tej samej cząstki, a więc zdefiniowane w tej samej lokalizacji. Dlatego sprzężenie między nimi pojawia się naturalnie, a operacje dwukubitowe wymagają pojedynczego przejścia między jednym z czterech stanów podstawowych elektronu. Z drugiej strony, aby uzyskać bramkę jednokubitową, działanie na danym kubicie w takiej podprzestrzeni musi być wykonywane niezależnie od drugiego stanu kubitu. Na szczęście, jeśli wykonamy jednocześnie obydwa kontrolowane doliną spinowe-NOT (dwa przejścia na Rys.2(d)), tj. $C_{\mathcal{K}}NOT_s$ i komplementarne, gdy przeciwny stan dolinowy kontroluje, $\bar{C}_{\mathcal{K}}NOT_s$, dochodzimy do pojedynczej bramki kwantowej spin-NOT: $\mathbf{1}_2 \otimes NOT_s$. To samo można zrobić dla kubitu dolinowego. Wierności uzyskiwanych bramek i schemat odczytu kubitów są także omówione w [2].

Przejdźmy teraz do sprzężenia **dwóch kubitów dolinowych**, zdefiniowanego na parze elektronów w podwójnej QD. W tym celu w [3] zaproponowałem i zasymulowałem działanie bramkowanej podwójnej QD z dwoma zlokalizowanymi elektronami, jak pokazano na Rys. 5(a,b). Ogólnie rzecz biorąc, dwa elektrony o spinie i dolinowych stopniach swobody tworzą 16 stanów. Zastosowanie pola magnetycznego pozwala, w wyniku rozszczepienia Zeemana, wybrać podprzestrzeń (spośród 16 stanów) o danej orientacji spinu (np. spin-up) w obu kropkach, a tym samym zaadresować dwa kubity dolinowe: zlokalizowane w lewej i prawej kropce. Na Rys. 5(d) zaznaczone są stany singletowe i trzy trypletowe utworzone przez izospiny dwóch elektronów w DQD (w podprzestrzeni spin-up). Stany te rozpinają przestrzeń układu dwóch kubitów dolinowych.

Jeśli teraz zainicjujemy układ w stanie singletowym S i zdefiniujemy składową z izospinu dolinowego po lewej $\mathcal{K}_z^L$ i prawej $\mathcal{K}_z^R$, obliczoną jako rzut stanu dwuelektronowego na daną dolinę wycałkowany osobno w lewej i prawej kropce (szczegóły można znaleźć w [3]), możemy badać różne operacje w tak zdefiniowanym układzie dwukubitowym. Udało mi się pokazać, że w takim układzie możemy z powodzeniem zlokalizować gęstość elektronów o danym składzie dolinowym w lewej kropce i niezależnie w prawej kropce. Oczywiście, aby możliwe było zlokalizowanie doliny w skończonym obszarze, np. w QD ze stanem reprezentowanym przez funkcję obwiedni o rozmiarze kilku nanometrów, stan kropki będzie składał się nie tylko ze stanu Blocha z minimum doliny, np. K, ale musi zawierać kompozycję różnych stanów wokół minimum doliny.

Podnieśmy na chwilę barierę potencjału między kropkami, przykładając odpowiednie napięcie do bramek G_3 i G_7 – patrz Rys. 5(a). Następnie, wykonując lokalne operacje na pojedynczych kubitach (przykładając lokalne napięcia, które modulują potencjał uwięzienia danej kropki, jak omówiono w sekcji 4.2) w L i R QD niezależnie – patrz 5(c), byliśmy w stanie uzyskać na Rys. 5(e) $\mathcal{K}_z^L = -1$ (lewy kubit w K') i $\mathcal{K}_z^R = 1$ (prawy kubit w K). Warto również zauważyć, że stan ten jest zrównoważoną kombinacją stanów S i T_0 z odpowiednią fazą.

Następnie obniżając barierę możemy uzyskać wymianę dolinową: $\mathcal{K}_z^L$ i $\mathcal{K}_z^R$ zaczynają oscylować, tak że po czasie $T_{\rm ex}$ możemy zaobserwować odwrócone orientacje izospinów: $\mathcal{K}_z^L = 1$ i $\mathcal{K}_z^R = -1$. Wymiana zachodzi z pewną całką wymiany J i czasem wymiany $T_{\rm ex}$, kontrolowanymi przez barierę tunelową – porównanie dynamiki dla różnych napięć V_B przyłożonych do bramek definiujących barierę ($G_{3,7}$) przedstawiono na Rys. 5(e). Przyjmując połowę czasu wymiany $T_{\rm ex}/2$ możemy otrzymać operację $\sqrt{\rm SWAP}$, która jest jedną z popularnych bramek dwukubitowych. Zarówno CNOT, jak i $\sqrt{\rm SWAP}$ są uniwersalne i mogą być przekształcane w siebie nawzajem [62].

Aby uzyskać pełną fizyczną implementację QC, oprócz operacji na pojedynczych kubitach i wymiany kubitów, potrzebujemy możliwości inicjalizacji stanu kubitów, a także możliwości pomiaru (odczytu) pojedynczych kubitów. Spośród wielu metod inicjalizacji i odczytu spinów w bramkowanych QD, najbardziej powszechnym podejściem jest wykorzystanie mechanizmu spinowej blokady Pauliego. In [3] pokazałem, że efekt blokady Pauliego można z powodzeniem rozszerzyć na dolinowy stopień swobody. Na Rys. 5(f) przedstawiono inicjalizację lub równorzędnie pomiar za pomocą procesu blokady dolinowej, gdzie układ początkowo w stanie singletowym S (krzywa pomarańczowa) wykazuje rezonans (co oznacza zwiększone prawdopodobieństwo przejścia między kropkami) przy niezerowym napieciu zródło-dren niż układ inicjalizowany w spolaryzowanym stanie trypletowym T_+ (zielona krzywa). Przykładowo, przy napięciu polaryzacji źródło-dren $V_{\rm bias} = 150$ mV dolinowy tryplet T_+ jest zablokowany, podczas gdy dla singletowego S możemy obserwować przepływ prądu przez podwójny układ QD, tj. zmianę obsadzenia $(1,1) \to (0,2)$. Blokada Pauliego może być użyta do inicjalizacji układu: oba izospiny ($\mathcal{K}_L$ i $\mathcal{K}_R$) zablokowane w konfiguracjach równoległych lub do odczytu pojedynczego kubitu (powiedzmy lewego): lewa kropka zostanie opróżniona tylko wtedy, gdy $\mathcal{K}_L$ jest w konfiguracji antyrównoległej do $\mathcal{K}_R$ (zakładamy, że stan prawej jest znany).

Dolinowa blokada Pauliego w materiałach dwuwymiarowych została niedawno zaobserwowana w przypadku grafenu [63], a wcześniej dla nanorurek węglowych [64], co pokazuje, że omawiane tutaj idee są obecnie przedmiotem intensywnych badań.

Obliczenia wykonane w pracy [3] zostały oparte na kodach napisanych podczas realizacji prac [1, 2], ale teraz rozszerzonych na układy wielociałowe. W opisie teoretycznym układu dwuelektronowego zastosowałem dokładną metodę oddziaływania-konfiguracji (ang. configuration-interaction, CI). Eksperymenty numeryczne zostały oparte na modelu TB w przestrzeni rzeczywistej dla monowarstwy MoS_2, który daje stany własne jednoelektronowe, które są następnie wykorzystywane do skonstruowania bazy wyznaczników Slatera dla przestrzeni konfiguracji dwóch elektronów. Całki Coulomba zostały obliczone w dokładny sposób. Ekranowane oddziaływanie elektron-elektron zostało wyrazone w tej bazie poprzez obliczenie kulombowskich elementów macierzowych dla zlokalizowanych orbitali typu Slater-Koster. Następnie rozwiązałem zależne od czasu równanie Schrödingera i uzyskałem dokładną ewolucję czasową układu dwuelektronowego. Podczas ewolucji jednocześnie rozwiązywałem

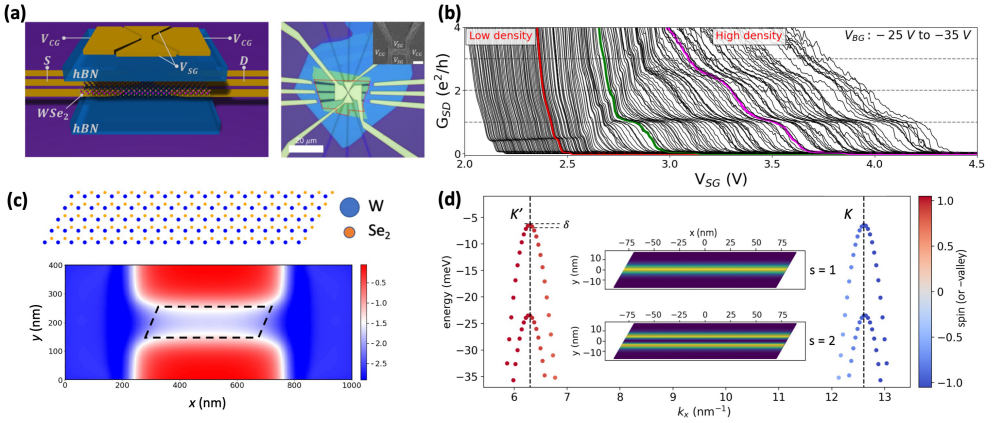

Figure 6. *(a) Schemat struktury urządzenia opartego o monowarstwę WSe_2 z dwiema bramkami V_{SG} tworzącymi kanał 1D wewnątrz monowarstwy. (b) Zmierzone stopnie przewodnictwa w różnych reżimach koncentracji dziur: obserwowano plateau przewodnictwa przy $2e^2/h$, ale także dla e^2/h co sugeruje występowanie mechanizmów łamania symetrii, takich jak polaryzacja dolinowa. (c) Mikroskopowy model TB dla realistycznego potencjału opisującego kanał daje (d) stany własne obsadzające obydwie doliny (dana orientacja spinu w każdej z dolin w reżimie silnej blokady spinowo-dolinowej) i tworzące paraboliczne podpasma, numerowane liczbą s, tworzące się ze względu na kwantyzację poprzeczną.*

równanie Poissona, znajdując potencjał uwięzienia dla układu dwuelektronowego kontrolowany przez napięcia przyłożone do bramek. Wykorzystując metodę CI, realistyczny opis oddziaływań kulombowskich oraz zależne od czasu równanie Schrödingera sprzężone z równaniem Poissona, które modeluje realistyczne środowisko dielektryczne, opisałem proponowane nanourządzenie o skomplikowanej geometrii ośmiu bramek i modulowanych w czasie potencjałach elektrycznych.

4.4. Wielociałowe efekty dolinowe

Osiągnięcia opisane w tej sekcji zostały opracowane na podstawie prac [5, 7].

Po zbadaniu możliwości implementacji kubitów na dolinowych stopniach swobody w dwuwymiarowych materiałach TMD, moje zainteresowania przeniosły się na zjawiska wielociałowe w strukturach o zmniejszonej wymiarowości, opartych na monowarstwach TMD. Moje zainteresowanie koncentrowało się głównie na kanałach kwantowych, które wydają się łatwiejsze do wytworzenia i zbadania za pomocą spektroskopii transportu elektronowego, niż QD, które wciąż czekają na solidną realizację eksperymentalną w TMD. Powody tego zostały omówione w sekcji 4.1. Inną motywacją do badania układów 1D jest to, że w celu opracowania obwodów kwantowych opartych na spinowych i dolinowych stopniach swobody w materiałach 2D, oprócz QD niezbędne są kanały 1D, które w rzeczywistości są rodzajem kwantowych kontaktów punktowych (QPC).

Byłem zaangażowany w opracowanie modelu teoretycznego dla eksperymentalnej realizacji jednowymiarowego kanału kwantowego zdefiniowanego w monowarstwie WSe_2 przez użycie lokalnych bramek [5]. Struktury kanałowe są łatwiejsze do wytworzenia niż elektrostatyczne QD. Badanie miało na celu znalezienie przyczyn zmierzonej anomalnej kwantyzacji przewodnictwa dziur w jednowymiarowym kanale WSe_2 charakteryzującym się wysoką ruchliwością dziur. W badanym urządzeniu, przedstawionym na Rys. 6(a), jednowarstwowy płatek WSe_2 zamknięty pomiędzy dwoma heksagonalnymi płatkami azotku boru (hBN) został ułożony na podłożu krzemowym p-domieszkowanym. Dwie górne bramki V_{SG} zostały użyte do zdefiniowania 1D-kanału w WSe_2 (poprzez ograniczenie 2D-gazu dziurowego) o szerokości litograficznej 200 nm i długości 600 nm.

Dziury w TMD charakteryzują się silnym rozszczepieniem SO w VB, co prowadzi do mechanizmu blokady spinowo-dolinowej. Dlatego, jeśli chodzi o pomiary transportu, oczekiwalibyśmy standardowej

kwantyzacji z dwoma modami dla zablokowanej pary spinowo-dolinowej, dającej stopnie przewodnictwa dla każdej krotności $2e^2/h$. Jednak, jak pokazano na Rys. 6(b), w eksperymencie zaobserwowano również stopnie kwantyzacji przewodnictwa w jednostkach e^2/h, podczas gdy dla nieoddziałujących dziur i podwójnej degeneracji spinowo-dolinowej możliwa jest tylko wielokrotność $2e^2/h$. W oparciu o mikroskopową atomistyczną teorię TB pokazujemy, że w tym materiale rzeczywiście degeneracje dolinowe i spinowe skutkują krokami przewodnictwa $2e^2/h$ dla nieoddziałujących dziur [5]. Zatem muszą występować w tym układzie mechanizmy łamania symetrii, które prawdopodobnie prowadzą do polaryzacji dolinowej i pojawia się pytanie, jaki efekt jest za to odpowiedzialny.

W celu ustalenia, czy anomalna kwantyzacja pochodzi od mechanizmu blokady spinowo-dolinowej w TMD, opracowałem w [5] model kanału 1D, zdefiniowany jako potencjał elektrostatyczny U^{ch} pokazany na Rys. 6(c), w ramach modelu TB H_{bulk} z bazą zdefiniowaną w przestrzeni k. Jednocząstowa funkcja falowa dla i-tego stanu dziury w kanale spełnia równanie Schrödingera:

$$\left(H_{\mathrm{bulk}} + H_{\mathrm{SO}} + |e|U^{\mathrm{ch}}\right)|\Psi^i\rangle = E^i|\Psi^i\rangle. \tag{4.8}$$

Aby uchwycić silny mechanizm blokady spinowo-dolinowej dla dziur w TMD, model zawiera wewnętrzne oddziaływanie SO, H_{SO}. Monowarstwa jest reprezentowana przez romboid obliczeniowy, obejmujący obszar kanału, w którym zdefiniowana jest sieć WSe_2 (jej przykład – nie w skali – jest przedstawiony na Rys. 6(c)). Zaczynamy od zwinięcia go w torus i nałożenia periodycznych warunków brzegowych. Daje to zbiór dozwolonych, dyskretnych wektorów $\mathbf{k}$. Funkcja falowa VB dla każdego $\mathbf{k}$ jest liniową kombinacją funkcji Blocha na podsieciach W i Se_2 numerowanych przez l: $|\psi^{\mathrm{VB}}_{\mathbf{k},\sigma}\rangle = \sum_{l=1}^{11} A^{\mathrm{VB}}_{\mathbf{k},\sigma,l}\left|\psi_{\mathbf{k},l}\right\rangle \otimes |\chi_\sigma\rangle$, gdzie $|\chi_\sigma\rangle$ jest spinorową częścią funkcji falowej, a $\left|\psi_{\mathbf{k},l}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}}\sum_{\mathbf{R}_l}^{N_c} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\varphi_l(\mathbf{r}-\mathbf{R}_l)$ są funkcjami Blocha zbudowanymi z orbitali atomowych φ_l: orbitali d dla wolframu i orbitali p zlokalizowanych na dimerach Se_2. Całkowita liczba komórek elementarnych jest określona przez N_c, podczas gdy $\mathbf{R}_l$ definiuje położenie orbitali atomowych w romboidzie obliczeniowym. Poprzez diagonalizację $H_{\mathrm{bulk}} + H_{\mathrm{SO}}$ dla każdej dozwolonej wartości $\mathbf{k}$ otrzymujemy pasma energetyczne $E^{\mathrm{VB}}_{\mathbf{k},\sigma}$ oraz funkcje falowe $A^{\mathrm{VB}}_{\mathbf{k},\sigma,l}$.

W następnym kroku rozwijamy funkcję falową dziury w kanale $|\Psi^i\rangle$ za pomocą stanów Blocha o najniższej energii w VB $|\psi^{\mathrm{VB}}_{\mathbf{k},\sigma}\rangle$:

$$|\Psi^{s,k_1,\sigma}\rangle = \sum_{k_2} B^{\mathrm{VB},s}_{k_1,k_2,\sigma}\left|\psi^{\mathrm{VB}}_{k_1,k_2,\sigma}\right\rangle, \tag{4.9}$$

gdzie k_1 i k_2 są indeksami numerującymi dozwolone wartości wektora $\mathbf{k}$. Wreszcie, rozwiązujemy równanie Schrödingera (4.8) z wyrazem potencjalnym U^{ch} poprzez przekształcenie go w równanie całkowe na współczynniki $B^{\mathrm{VB},s}_{k_1,k_2\sigma}$,

$$E^{\mathrm{VB}}_{k_1,q_2,\sigma}B^{\mathrm{VB},s}_{k_1,q_2,\sigma} + \sum_{k_2} B^{\mathrm{VB},s}_{k_1,k_2,\sigma}V^{\mathrm{ch}}_{k_1,q_2;k_1,k_2,\sigma} = E^s_{k_1\sigma}B^{\mathrm{VB},s}_{k_1,q_2,\sigma}, \tag{4.10}$$

gdzie potencjał elektrostatyczny U^{ch}, pokazany na Rys. 6(c), ubrany przez wkład pasmowy $A^{\mathrm{VB}}_{k_1,k_2,\sigma,l}$ prowadzi do elementów rozpraszających:

$$V^{\mathrm{ch}}_{k_1,q_2;k_1,k_2,\sigma} = \sum_l A^{\mathrm{VB},*}_{k_1,q_2,\sigma,l}A^{\mathrm{VB}}_{k_1,k_2,\sigma,l}\,U^{\mathrm{ch}}_l(k_1,q_2;k_1,k_2).$$

W powyższym $U^{\mathrm{ch}}_l(k_1,q_2;k_1,k_2)$ jest transformatą Fouriera potencjału uwięzienia kanału na każdej podsieci l: $U^{\mathrm{ch}}_l(\mathbf{q},\mathbf{k}) = \frac{1}{N_c}\sum_{\mathbf{R}_l}^{N_c} U^{\mathrm{ch}}(\mathbf{R}_l)e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{R}_l}$.

Po rozwiązaniu Eq. 4.10 otrzymujemy stany własne pojedynczej dziury uwięzionej w kanale $|\Psi^{s,k_1,\sigma}\rangle$. Stany kanału, przedstawione na Rys. 6(d), o energii $E^s_{k_1\sigma}$ są scharakteryzowane przez indeks

podpasma s, przez spin σ, a także przez obsadzenie doliny, określone przez wektor falowy k_1 wzdłuż kanału. Należą one do dwóch różnych dolin: K' ze spinem w górę i K ze spinem w dół, tworząc stany podwójnie zdegenerowane w blokadzie spinowo-dolinowej. Charakterystyczne paraboliczne podpasma powstają w wyniku bocznej kwantyzacji w kanale i są numerowane liczbą kwantową s. Po obliczeniu stanów własnych dla pojedynczej cząstki jesteśmy w stanie oszacować przewodnictwo przez kanał 1D, np. przy użyciu 2-terminalowej formuły Landauera [65]. Ze względu na podwójną degenerację obliczona przewodność musi mieć plateau przy wielokrotnościach $2e^2/h$. Stąd widzimy, że zmierzona kwantyzacja przewodnictwa e^2/h nie może być wyjaśniona w obrazie jednocząstkowym.

Dlatego w następnej pracy [7] przedstawiam teorię oddziałujących dziur w zdefiniowanym przez bramki 1D-kanale kwantowym w monowarstwie WSe_2 i demonstruję możliwość wystąpienia łamiących symetrię stanów spolaryzowanych dolinowo dla silnie oddziałujących dziur z obecnym prostopadłym polem magnetycznym lub asymetrią uwięzienia bocznego. Asymetria uwięzienia wraz z silnym sprzężeniem spin-orbita Rashby, dostępnym w WSe_2, jest obecna w strukturze kanału. Zaczynam od jednocząstkowego modelu kanału 1D, jak omówiono wcześniej, a następnie badam wpływ oddziaływań wielociałowych na stany podstawowe i wzbudzone dla kompleksów zawierających do sześciu dziur w kanale, porównując wyniki HF z CI.

Zaczynam od bazy stanów jednodziurowych $|i\rangle = |\Psi^{s,k_1,\sigma}\rangle$. W tej bazie hamiltonian z odziaływaniem dziura-dziura może być zapisany jako:

$$H_{hh} = -\sum_i E^i h_i^\dagger h_i + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\langle ij|V/\epsilon|kl\rangle h_i^\dagger h_j^\dagger h_l h_k, \tag{4.11}$$

gdzie $h_i^\dagger$ tworzy dziurę w stanie jednocząstkowym $|i\rangle$, $\langle ij|V/\epsilon|kl\rangle \equiv V_{ijkl}$ są ekranowanymi elementami macierzy kulombowskiej, a ϵ jest stałą dielektryczną. Elementy macierzy kulombowskiej $\langle ij|V/\epsilon|kl\rangle \equiv V_{ijkl}$ zostały obliczone realistycznie w taki sam sposób, jak dla układu dwudoliniowego omówionego w artykule [3] (oraz w sekcji 4.3).

Następnie definiujemy bazę skończonej liczby stanów jednodziurowych $|i\rangle$, obsadzamy ten zbiór stanów jednocząstkowych daną liczbą N dziur i generujemy wszystkie możliwe konfiguracje: $|p\rangle = h_{i_1}^\dagger h_{i_2}^\dagger \ldots h_{i_N}^\dagger|0\rangle$. Następnie rozwijamy wielociałową funkcję falową w bazie wszystkich możliwych konfiguracji p ze współczynnikami A_p^ν: $\Psi^\nu = \sum_p A_p^\nu|p\rangle$. Teraz A_p^ν oraz E_ν są, odpowiednio, wektorami własnymi i wartościami własnymi skorelowanego stanu wielodziurowego ν. Aby znaleźć te skorelowane stany, włączamy oddziaływania między konfiguracjami wywołane oddziaływaniem kulombowskim i budujemy hamiltonian oddziaływania-konfiguracji H_{hh}, Eq. 4.11. Diagonalizujemy go w przestrzeni konfiguracji i analizujemy widma wielu ciał dla różnych sił oddziaływania kulombowskiego. Obliczam również całkowitą polaryzację dolinową $P = \sum_p |A_p^\nu|^2 (\langle p|K'|p\rangle - \langle p|K|p\rangle)$, z $\langle p|K'|p\rangle$ zliczającym dziury w dolinie K' w konfiguracji p (i to samo dla doliny K).

Rys. 7(a) pokazuje niskoenergetyczne widmo E_ν skorelowanych dziur dla różnych sił oddziaływania kulombowskiego, kontrolowanych przez stałą dielektryczną ϵ. Konfiguracje spolaryzowane spinowo-dolinowo są dubletami, oznaczonymi tutaj kolorami czerwonym i niebieskim, podczas gdy konfiguracje niespolaryzowane są oznaczone kolorem szarym. Dla słabych oddziaływań ($\epsilon = 100$), stan podstawowy (GS) jest niespolaryzowany dolinowo i oddzielony od reszty widma jednocząstkową przerwą δ, pojawiającą się pomiędzy stanami zapełnionymi i pustymi. Zwiększenie oddziaływań zmniejsza przerwę i ostatecznie, dla silnych oddziaływań $\epsilon \lesssim 5$, tworzy się charakterystyczny tryplet. Trzy zdegenerowane stany, reprezentujące tryplet dolinowy, tworzą GS z częściową polaryzacją. W [7] pokazałem również, że pojawienie się GS w formie trypletu dolinowego można również zrozumieć za pomocą prostych rozważań analitycznych obejmujących TRS. Zauważamy też, że przybliżone wyniki HF pokazane dla porównania na Rys. 7(b), składające się tylko z pojedynczej konfiguracji w formie wyznacznika Slatera, różnią się znacząco od skorelowanych wyników CI z częściową polaryzacją dolinową. Jest to znany problem, że przybliżenie HF przeszacowuje polaryzację spinową (dolinową) [66].

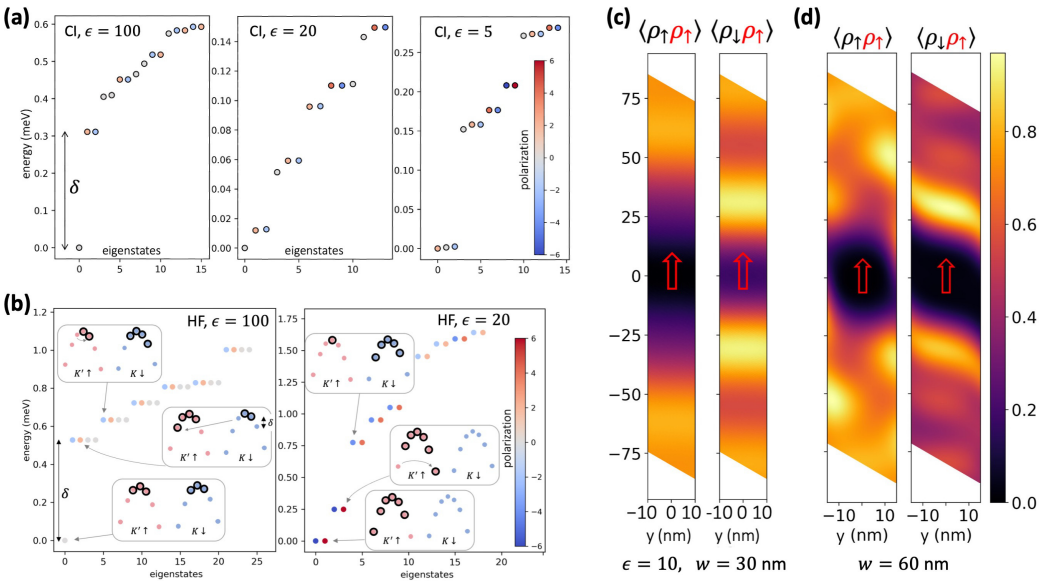

Figure 7. *(a) Energie skorelowanych stanów $N = 6$ dziur dla różnych sił oddziaływania (kontrolowanych poprzez zmniejszanie ϵ). (b) To samo, ale dla konfiguracji Hartree-Focka. Funkcja korelacji par dowodzi możliwości istnienia (c) dolinowych faz antyferromagnetycznych i (d) zygzakowatej krystalizacji Wignera w kanale WSe_2.*

Teraz najprostszym sposobem na rozdzielenie spolaryzowanych stanów tworzących trypletowy GS i uzyskanie spolaryzowanych stanów dolinowych ze złamaną symetrią jest zastosowanie prostopadłego pola magnetycznego B_z. Inne podejście do tworzenia rozszczepienia spin/dolina polega na wykorzystaniu bocznej asymetrii (inwersji) struktury, która objawia się bocznym polem elektrycznym E_y. Prowadzi to do pola SO Rashby, które może również dawać dolinowo spolaryzowany stan podstawowy. Warto także podkreślić, że to dzięki oddziaływaniom można pokonać przerwę δ, związaną z kwantyzacją przestrzenną wynikającą ze skończonej długości kanału, a następnie zastosowanie pola magnetycznego lub uwzględnienie pola Rashby daje możliwą polaryzację dolinową GS. W rezultacie, dzięki oddziaływaniom, złamanie symetrii dolinowej (spinowej) umożliwia uzyskanie kwantyzacji przewodnictwa o stopniach będących wielokrotnością e^2/h, jak zmierzono w [5] i przedstawiono na Rys. 6(b).

Następnie podczas badań wprowadziłem spinowo-zależną funkcję korelacji par i przewidziałem pojawienie się interesujących zjawisk wielociałowych w nanostrukturach WSe_2: dolinowego uporządkowania antyferromagnetycznego i krystalizacji Wignera w kanale. Jeśli teraz przeanalizujemy funkcję korelacji par, to dla słabszych oddziaływań ($\epsilon > 5$) możemy zaobserwować charakterystyczne uporządkowanie antyferromagnetyczne (AFM) gęstości spinowo-dolinowej z naprzemiennymi gęstościami spin-up/down (K'/K), zaprezentowane na Fig. 7(c). Należy zauważyć, że ze względu na efekt blokady spinowo-dolinowej (gdzie każda dolina jest powiązana z określonym spinem) w materiałach TMD, uporządkowanie spinowe automatycznie skutkuje przestrzennym uporządkowaniem dolinowym dla dziur. W związku z tym, określamy to uporządkowanie jako valley-AFM, analogicznie do antyferromagnetyzmu spinowego. Typowa separacja przestrzenna między sąsiednimi domenami dolinowymi wzdłuż kanału, jak pokazano na Rys. 7(c), wynosi około $\tau_K = 30$ nm.

Przeanalizujmy teraz efekt zmniejszenia gęstości dziur. W 2DEG przy niskiej gęstości energia potencjalna dominuje nad kinetyczną i tworzy się kryształ Wignera [67]. W kanale 1D również można zaobserwować krystalizację Wignera [68]. Jednak w układzie quasi 1D na granicy tych dwóch faz pojawia się inne uporządkowanie. Gdy obecna jest dodatkowa skala energii zdefiniowana przez potencjał ograniczający U^{ch}, dziurom energetycznie opłaca się oddalać od środka kanału gdy energia uwięzienia

i odpychanie kulombowskie są równe: $U^{\mathrm{ch}}(r_0) = \frac{e^2}{\epsilon r_0}$ [69]. Prowadzi to do *zygzakowatej* fazy Wignera [70]. Aby sprawdzić, czy możliwe jest zaobserwowanie krystalizacji Wignera w naszym urządzeniu, zmniejszyłem gęstość dziur i przeanalizowałem zachowanie funkcji korelacji par. Dwukrotne zmniejszenie gęstości, przy dwukrotnym zwiększeniu szerokości kanału z $w = 30$ do $w = 60$ nm, skutkuje pojawieniem się konfiguracji zygzakowatej, szczególnie w składowej $\langle \rho_\uparrow \rho_\uparrow \rangle$ funkcji korelacji par – patrz Rys. 7(d). Co również bardzo interesujące, dodatkowe plateau przewodnictwa odpowiadające wartości $0.5e^2/h$ zostało również zaobserwowane w [5] i można je zobaczyć na Rys. 7(b). Jego pojawienie się jest prawdopodobnie związane z tworzeniem się zygzakowatej krystalizacji Wignera [71].

4.5. Podsumowanie

Wyniki przedstawione w serii publikacji będących przedmiotem niniejszego osiągnięcia badawczego są zgodne z następującymi długoterminowymi celami badawczymi:

- zbadanie możliwości implementacji kubitów na dolinowym stopniu swobody dostępnym w dwuwymiarowych materiałach półprzewodnikowych typu TMD, a następnie opracowanie nanostruktur zdolnych do uniwersalnego przetwarzania informacji kwantowej z wykorzystaniem tego typu kubitów,
- nawiązanie współpracy z grupami eksperymentalnymi i zainspirowanie eksperymentów z budową i badaniem właściwości bramkowanych nanourządzeń opartych na monowarstwach TMD z kluczową dostępnością dolinowego stopnia swobody,
- badanie nowych zjawisk fizycznych w półprzewodnikach 2D związanych z dolinowymi stopniami swobody, z naciskiem na efekty pojawiające się w układach silnie skorelowanych.

W ramach programu badawczego opracowałem propozycję pełnej implementacji QC na dolinowym stopniu swobody w oparciu o bramkowane nanostruktury zawierające różne materiały TMD:

- W [1] pokazałem, jak wymusić przejścia międzydolinowe poprzez modulację potencjału uwięzienia w wąskiej bramkowanej QD, stosując oscylujące napięcia na lokalnych bramkach.
- W [4] omawiam również możliwość powstania kubitu spinowo-dolinowego w realistycznej strukturze QD zdefiniowanej przez lokalny potencjał pobliskiej końcówki STM.
- Podczas gdy w [6] badałem możliwość indukowania przejść międzydolinowych w bramkowanej QD zlokalizowanej w pobliżu złącza. Złącze jest zdefiniowane na planarnej heterostrukturze dwóch TMD połączonych wzdłuż krawędzi typu ‘armchair’.
- Demonstrując w [3] wymianę lub odczyt dwóch kubitów dolinowych poprzez blokadę Pauliego, udowodniłem, że kubity dolinowe w półprzewodnikach z rodziny TMD spełniają kryteria uniwersalności i stanowią skalowalną platformę do obliczeń kwantowych.
- W [2] pokazuję to samo, ale dla hybrydowego układu dwóch kubitów zdefiniowanego na spinie i dolinie pojedynczego nośnika.

Wszystkie omawiane nanostruktury zostały realistycznie zamodelowane przy użyciu moich własnych kodów solwera Poissona-Schrödingera, napisanych od podstaw, zarówno dla obliczeń stacjonarnych, jak i zależnych od czasu dla zewnętrznie kontrolowanych zmiennych Hamiltonianów.

W opisie teoretycznym układów dwuelektronowych i wielodziurowych użyłem dokładnej metody CI. Oddziaływanie kulombowskie i potencjał uwięzienia zostały zamodelowane realistycznie, z uwzględnieniem szczegółow elementów macierzowych pomiędzy orbitalami atomowymi, ekranowania przez pobliskie warstwy dielektryczne, oraz napięć przyłożonych do układu bramek kontrolnych o geometrii inspirowanej eksperymentem. Wyniki stacjonarne dają bazę stanów ubranych w oddziaływania między nośnikami wykorzystywaną następnie w obliczeniach CI zależnych od czasu.

W przypadku CI zależnego od czasu, zmienne napięcia sterujące modulują potencjał uwięzienia, prowadząc do nietrywialnego działania urządzenia wyznaczonego za pomocą zależnego od czasu równania Schrödingera i rozwiązanego w bazie CI w sposób samozgodny z równaniem Poissona. Wszystkie te kody zostały napisane i zoptymalizowane od podstaw przeze mnie.

Próba nawiązania współpracy z grupą eksperymentalną [5] pozwoliła na dokładne zbadanie struktury kanału bramkowanego utworzonego w monowarstwie WSe_2. Badania teoretyczne polegające na modelowaniu pomiarów przewodnictwa wykazały, że zmierzonego anomalnego przewodnictwa nie można wyjaśnić za pomocą obrazu jednocząstowego [5], a zatem potrzebne było zrozumienie efektów wielociałowych [7]. Dzięki temu wyjaśniłem:

- możliwość występowania stanów spolaryzowanych dolinowo, wyjaśniając anomalne przewodnictwo w kanale 1D zarówno w HF, jak i przy użyciu dokładnej diagonalizacji (CI), gdzie znajdujemy stany częściowo spolaryzowane dolinowo,
- poprzez analizę funkcji korelacji par, która ujawnia dolinową fazę antyferromagnetyczną w reżimie słabszych oddziaływań w tych materiałach,
- a także, dla niskich gęstości dziur, powstawanie zygzakowatych stanów krystalicznych Wignera, których obecność może tłumaczyć istnienie plateau przewodnictwa odpowiadającego wartości $0.5e^2/h$, obserwowanego również w [5].

Wpływ różnych faz cieczy dziurowej na transport w quasi-jednowymiarowym kanale o wysokiej ruchliwości został również omówiony w [7]. W ramach kontynuacji badań przedstawiono kolejną pracę teoretyczno-eksperymentalną analizującą stany Landaua w tych materiałach [72].

We współpracy z innymi grupami badawczymi [8, 6] mamy nadzieję stworzyć wąską bramkowaną QD, i ostatecznie spróbować zrealizować eksperymentalnie, kontrolowany elektrycznie qubit dolinowy. Prace w toku.

5. Prezentacja znaczącej działalności naukowej lub artystycznej prowadzonej w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub kulturalnej, w szczególności w instytucjach zagranicznych

Moje zainteresowania badawcze obejmują kilka obszarów fizyki materii skondensowanej, ze szczególnym uwzględnieniem zjawisk umożliwiających zastosowanie materiałów 2D w implementacji obliczeń kwantowych. Jednocześnie od kilku lat interesuję się metodami sztucznej inteligencji i ich zastosowaniem w fizyce. Tutaj omawiam kierunki, które nie zostały omówione w sekcji 4. Zaczynam, w sekcji 5.1, od możliwych rozszerzeń kubitu opartego na dolinie K do układu kutrytowego na dolinie Q, przedstawionych w niepublikowanym manuskrypcie [9]. Zdecydowałem się wspomnieć o tych wynikach tutaj, ponieważ są one ściśle związane z osiągnięciami przedstawionymi w sekcji 4. W następnym rozdziale, 5.2, omówię inne osiągnięcia, wypracowane po uzyskaniu stopnia doktora.

5.1. Kutryt dolinowy

Osiągnięcia opisane w tym podrozdziale zostały opracowane na podstawie pracy [9].

W sekcji 4 omówiłem metody efektywnego manipulowania kubitami dolinowymi. Jedną z nich jest sprzężenie elektronu w QD z bocznymi heterostrukturami TMD. Okazuje się jednak, że również pionowe (wertykalne) ułożenie dwóch TMD tworzących heterostrukturę, jak pokazano na Rys. 8(a), może prowadzić do interesującej fizyki. W [9] opracowaliśmy model DFT dla takiej heterostruktury, a także zbudowaliśmy dla niej pełną teorię TB (składającą się w sumie z 44 orbitali). W wertykalnej heterostrukturze $MoSe_2/WSe_2$ pasmo przewodnictwa składa się z 6 nierównoważnych dolin Q dla obu spinów, co daje 3 możliwe doliny w każdej podprzestrzeni spinowej ($Q_{1,2,3}$ i $Q'_{1,2,3}$) – patrz Rys. 8(b,c). Następnie zbadałem nowe możliwości definiowania kubitów nie tylko na dwóch dolinach K, aktywnych w monowarstwach TMD, ale także przy użyciu trzech dolin Q, tworząc możliwą platformę do definiowania *qutrytu* – rozszerzenia qubitu na kwantowy układ 3-stanowy. Qutryt jest zdefiniowany w trójkątnym płatku $MoSe_2/WSe_2$ składającym się z 3 bocznych heterozłączy z dwuwarstwą $MoSe_2$ wzdłuż krawedzi typu 'zygzak' – patrz Rys. 8(d), uzupełnionych trzema górnymi bramkami G_i tworzącymi boczny potencjał gaussowski lokalizujący elektron w środku trójkąta i kontrolujący jego oddziaływanie ze złączami. Kontrolowane rezonanse z trzema różnymi krawędziami pozwalają na selektywny wybór

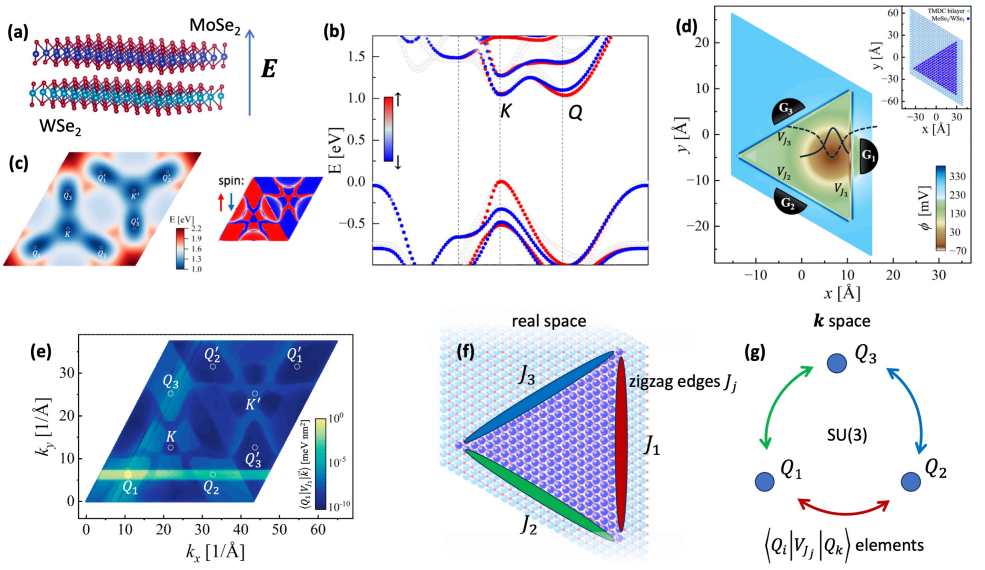

Figure 8. *W (a) wertykalnej heterostrukturze $MoSe_2/WSe_2$ CB (b,c) składa się z sześciu nierównoważnych dolin Q. Tworząc (d) trójkątny płatek otoczony dwuwarstwą $MoSe_2$ i trzema bramkami G_i lokalizującymi elektron w środku trójkąta, oraz (f) kontrolując jego oddziaływania z brzegami trójkąta (złączami) możemy indukować (e) sprzężenie między wybranymi dolinami Q, tutaj $\langle Q_1|Q_2\rangle$. (f) Daje to nową możliwość zdefiniowania półprzewodnikowego qutrytu – uogólnienia kubitu na układ 3-stanowy.*

sprzężeń międzydolinowych $\langle Q_i|Q_j\rangle$. Na przykład, na Rys. 8(e) mamy nieznikający element $\langle Q_1|Q_2\rangle$ ze względu na interakcję ze złączem V_{J_1}, jak pokazano na Rys. 8(d). W ten sposób pokazaliśmy jak wykonywać operacje w podprzestrzeni dolin Q_i, co jest niezbędne do wykonania dowolnej operacji na pojedynczym kutrycie, jak pokazano na Rys. 8(f,g). Trójkątne wyspy w TMD mogą wzrastać epitaksjalnie [73] lub pojawiać się w postaci skalowalnych trójkątnych defektów [74].

5.2. Inne osiągnięcia po uzyskaniu stopnia doktora

Oprócz badania dolinowego stopnia swobody, zajmowałem się wieloma innymi tematami.

Byłem zaangażowany w budowanie realistycznych modeli nanodrutów i heterostruktur Rashby, czyli takich gdzie występuje silne, elektrycznie kontrolowane sprzężenie SO. W pracy [75] badałem możliwości wykonywania operacji na kubitach spinowych za pomocą modulowanych czasowo pól Rashby. Badałem również generowane w ten sposób stany koherentne [76], czy tzw. stany kota Schrödingera (znane z optyki kwantowej) elektronu w takich strukturach [77], a wreszcie możliwości inicjalizacji i odczytu spinu w tego typu układach [78, 79, 80, 81].

Interesowało mnie również wykorzystanie metod uczenia maszynowego i możliwości trenowania głębokich sieci neuronowych (NN) do wykrywania splątania w układach wielokubitowych. W przypadku stanów czystych dekompozycja Schmidta pozwala określić, czy dwa podsystemy są splątane przy założonym podziale na dwie części. Niestety, w przypadku stanów mieszanych nadal nie znamy żadnej ogólnej, łatwej do obliczenia miary analitycznej do określenia splątania [82]. Dobrze znane kryterium Peresa (PPT) nie jest wystarczające dla układów większych niż 2×3 [83].

- W pracy [84] wykazano, że dzięki nadzorowanemu treningowi NN na stanach o znanym splątaniu (dla których PPT jest rozstrzygające), sieć jest w stanie nauczyć się poprawnie klasyfikować tego typu stany. Co więcej, wybierając architekturę NN (tzw. sieci syjamskie) i dodając odpowiednią regularyzację wymuszającą niezmienniczość klasyfikacji splątania w odniesieniu do permutacji kubitów

lub lokalnych operacji unitarnych, udało nam się uzyskać uogólnienie przewidywania NN na stany mieszane typu PPTES (tj. takie, dla których kryterium PPT nie działa).
- Z kolei w pracy [85] użyliśmy NN w postaci autoenkodera (sieć enkoder-dekoder) wytrenowanego w sposób nienadzorowany do wykrywania splątania przy użyciu techniki wykrywania anomalii (NN widziała tylko stany separowalne podczas treningu). Wprowadziłem tam nowatorskie rozwiązanie, w którym dekoder (przez który, na etapie propagacji wstecznej, przepływa informacja o błędzie podczas treningu) został zaimplementowany jako formuła analityczna (definiująca mieszany stan separowalny), podczas gdy architektura enkodera została starannie zaprojektowana: zachowywała separowalność, a jego wyjście było ekwiwariantne względem permutacji kubitów. Interesujące było również odkrycie, że proponowany detektor radzi sobie znacznie lepiej z rozróżnianiem słabszej formy korelacji kwantowych, a mianowicie tzw. dysonansu kwantowego (quantum discord), niż splątania.

Oprócz tego byłem zaangażowany w zastosowanie głębokich sieci neuronowych do rozpoznawania obiektów na obrazach mikrobiologicznych [86, 87, 88], lub do innych zastosowań przemysłowych [89]. Podczas tych projektów we współpracy z różnymi firmami nauczyłem się implementacji, trenowania i innych praktycznych aspektów głębokich sieci neuronowych. Sieci neuronowe [90], czy metody optymalizacji oparte na algorytmach ewolucyjnych [91], były także przedmiotem prac, w których rozwijałem techniki poszukiwania optymalnych modeli dyskretnych opisujących materiały magnetyczne o szerokim zakresie odpowiedzi częstotliwościowej i punktów pracy (na nieliniowych charakterystykach magnesowania) do zastosowań w inżynierii systemów elektroenergetycznych.

Aktualną listę publikacji i preprintów można znaleźć na moim profilu w bazie Google Scholar: https://scholar.google.com/citations?view_op=list_works&hl=pl&hl=pl&user=xe34UC4AAAAJ

5.3. Dane bibliometryczne

- Cytowania wg. Web of Science (Google Scholar): 247 (389) / WoS bez autocytowań: 198
- h-index: 10 (13)

6. Prezentacja osiągnięć dydaktycznych i organizacyjnych oraz osiągnięć w zakresie popularyzacji nauki lub sztuki

6.1. Granty – jako kierownik projektów

- (**2022-2025**) Kierownik grantu SONATA Narodowego Centrum Nauki (NCN), temat: "Realistyczne modelowanie nanourządzeń kwantowych opartych na nowoczesnych materiałach 2D". Projekt numer 2021/43/D/ST3/01989.
- (**2022-2023**) Kierownik projektu MOCART urzędu miasta Wrocławia na "Opracowanie innowacyjnego algorytmu do weryfikacji zabezpieczeń w postaci mikroskopowych oznaczeń holograficznych z wykorzystaniem metod sztucznej inteligencji" we współpracy z firmą Nanores [92].
- (**2016-2019**) Kierownik grantu FUGA NCN, temat: "Projekt i symulacja działania nanourządzeń spintronicznych zbudowanych na bazie nowoczesnych nanomateriałów: monowarstw dwusiarczku molibdenu i innych chalkogenków metali przejściowych". Projekt numer 2016/20/S/ST3/00141.

6.2. Granty – jako wykonawca

- (**2019-2024**) Wykonawca w grancie SONATA-BIS NCN w ramach współpracy z Politechniką Warszawską, temat: "Nowe metody budowania dynamicznych nieliniowych modeli pierścieni magnetycznych z użyciem algorytmów sztucznej inteligencji dla warunków zmienno-częstotliwościowych i wielkoprądowych". Projekt numer 2019/34/E/ST7/00187.
- (**2018-2021**) Wykonawca w grancie Szybka Ścieżka Narodowego Centrum Badań i Rozwoju w ramach współpracy z NeuroSYS [93], temat: "Opracowanie nowej metody rozpoznawania i identyfikacji

kolonii bakteryjnych z użyciem sztucznych sieci neuronowych i algorytmów Machine Learning". Projekt numer POIR.01.01.01-00-0040/18.
- (**2015-2018**) Wykonawca projektu OPUS NCN: "Sterowane elektrostatycznie oddziaływanie spin-orbita w zastosowaniu do operacji na spinie pojedynczego elektronu (lub dziury) w nanostrukturze półprzewodnikowej". Projekt numer UMO-2014/13/B/ST3/04526.
- (**2009-2012**) Wykonawca w projekcie finansowanym przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego pt. "Badania teoretyczne wykorzystania oddziaływania spin-orbita w półprzewodnikach do budowy kwantowych bramek logicznych". Projekt numer N N202 12833.

6.3. Działalność zawodowa

- Członek komitetu programowego kierunku Big Data Analytics na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki PWr.
- Recenzent w czasopismach APS: Phys. Rev. B (12 recenzji), Phys. Rev. Appl. (6), Phys. Rev A (2), Phys. Rev. Res. (2), Phys Rev. Lett (2); Inne czasopisma, poświęcone ML: Machine Learning Science and Technology (3), IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems (1).
- Działalność w komitecie organizacyjnym Warsztatów Naukowych – cyklu 3 konferencji w ramach Interdyscyplinarnych Studiów Doktoranckich (ISD) na AGH. Również edycja i skład wydawnictwa zawierającego materiały z tych konferencji [94].
- Organizacja dorocznego Sympozjum Instytutu Fizyki Teoretycznej PWr (Lądek Zdrój, 2023).
- Organizacja warsztatów deep-learning dla licealistów [95] (2023).

6.4. Działalność dydaktyczna i nadzór nad studentami

Nauczanie

Na Politechnice Wrocławskiej prowadzę (2022-) mój autorski kurs Machine-Learning – Applications [96] (wykład + ćwiczenia laboratoryjne dla kierunku Big Data Analytics), gdzie zapoznaję studentów z teorią i praktyką uczenia maszynowego (ML), głównie w zastosowaniu do przetwarzania sygnałów i obrazów. Oprócz tego posiadam doświadczenie w prowadzeniu takich kursów jak Dynamika Nieliniowa będąca wprowadzeniem w dziedzinie nieliniowych równań różniczkowych, czy Metody Obliczeniowe Fizyki i Techniki z wprowadzeniem do metod numerycznych, czyli podstaw wykonywania symulacji na komputerach. Inne kursy jakie prowadziłem to Algebra (ćwiczenia rachunkowe), Programowanie w C, oraz Laboratorium Podstaw Fizyki.

Opieka i współpraca

- Promotor pomocniczy doktoratu na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH w Krakowie: Michał Górski (2015-2020). Rozprawa pt. "Szybka inicjalizacja spinu elektronów uwięzionych w elektrostatycznych kropkach kwantowych zbudowanych na bazie katalitycznie hodowanych półprzewodnikowych drutów kwantowych" obroniona 25.05.2021.
- Promotor pomocniczy doktoranta Mateusza Krawczyka (2021-), Instytut Fizyki Teoretycznej, Politechnika Wrocławska. W trakcie realizacji.
- Opiekun magistrantów: Mateusz Krawczyk (2021), Filip Płosiński (2021), Wojciech Żuławiński (2021), Michał Mońko (2022), Stanisław Zamora (2022), Mikołaj Jędrzejewski (2023), Anna Kudela (2023), Oskar Kulig (2023), Jędrzej Podolak (2023), Karolina Schmidt (2023), Maciej Bobak (2024), Jakub Jastrzębski (2024), Naum Mukti (2024), Jakub Opala (2024), Michel Weyders (2024).
- Opiekun inżynierantów: Emilia Włodek (2023), Wiktoria Matuszek (2024).
- Opieka nad doktorantką Katarzyną Sadecką i magitrantem Jakubem Jastrzębskim oraz współpraca z dr. Maciejem Bieńkiem w ramach realizacji grantu Sonata NCN (2022-2025).
- Opiekun koła naukowego Nabla Quantum Computing Team (2023-2024).

7. Inne ważne informacje dotyczące kariery zawodowej

7.1. Krótkie pobyty w instytucjach badawczych po uzyskaniu stopnia doktora

- University of Würzburg, prof. Ronny Thomale group (1 tydzień we wrześniu 2023).
- University of Regensburg, prof. Milena Grifoni group and prof. Jaroslav Fabian group (2 tygodnie w październiku 2023).

7.2. Wykłady na zaproszenie po uzyskaniu stopnia doktora

- Seminarium Instytutu Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Wrocławskiego: "Machine-learned criteria for quantum correlations" (7 VI 2024).
- Wykład wygłoszony w ramach Wrocławskiego Dnia Fizyki organizowanego przez PTF: "Czy możemy nauczyć sieć neuronową fizyki? Czyli o uczeniu maszynowym w nauce." (25 V 2024).
- Seminarium Wydziału Teorii Materii Skondensowanej w Instytucie Fizyki Czeskiej Akademii Nauk, Praga: "From valley qubits to many-body effects in 2D materials" (30 IV 2024).
- Seminarium na Uniwersytecie w Regensburgu (SFB seminar): "From valley qubits, many-body valley effects to machine learned classifiers of qubit correlations" (17 X 2023).
- Seminarium na Uniwersytecie w Würzburgu (Ronny Thomale group): "Valley qubits and many-body valley effects" (1 IX 2023).
- Wykład dla koła studenckiego NABLA na PWr, Wroclaw: "Detection and classification of quantum entanglement using deep neural networks" (18 April 2023).
- Seminarium Instytutu Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Wrocławskiego: "Solid-state quantum computing – a simple overview" (6 IV 2020).
- Seminarium Katedry Informatyki Stosowanej i Fizyki Komputerowej, AGH: "Fast initialization of an electron spin trapped in an electrostatic quantum dot" (26 XI 2018).
- Seminarium Coherence-Correlations-Complexity, Wydział Podstawowych Problemów Techniki, PWr: "Spin-valley two-qubit system in an atomically-thin layer of molybdenum disulfide" (9 V 2018).
- Seminarium Coherence-Correlations-Complexity Seminar, Wydział Podstawowych Problemów Techniki, PWr: "Schrödinger's cat states in semiconductor quantum wires" (30 XI 2016).
- Seminarium Zakładu Fizyki i Inżynierii Materiałowej, Instytut Fizyki Jądrowej, Polska Akademia Nauk, Krakow: "Rashba-type spin-orbit interactions in semiconductor structures and beyond" (24 II 2015).
- Seminarium Coherence-Correlations-Complexity, Wydział Podstawowych Problemów Techniki, PWr: "Operations on single-electron spins in a quantum dot without using a magnetic field" (17 XII 2014).

7.3. Udział w konferencjach i warsztatach po uzyskaniu stopnia doktora

- 19th Theory of Quantum Computation, Communication and Cryptography (TQC) conference, September 2024, Okinawa, Japan; poster: "Identification of quantum entanglement with supervised and unsupervised machine-learning models".
- 36th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS), July 2024, Ottawa, Canada; talk: "Qubits and Qutrits in TMD nanostructures".
- Joint ICTP-WE Heraeus School and Conference on Frontiers at the Intersection of Quantum Simulation and Machine Learning, April 2024, ICTP Trieste, Italy; poster: "Identification of quantum entanglement with supervised and unsupervised neural-network models".
- 25th International Conference on the Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (EP2DS-25) and the 21st international Conference on Modulated Semiconductor Structures (MSS-21), July 2023, Grenoble, France; poster: "Valley correlations and Wigner zigzag phase of interacting holes in a gated WSe_2 quantum channel".

- 9th Machine Intelligence and Digital Interaction – MIDI Conference, December 2021, online; talk "Deep neural networks approach to microbial colony detection—a comparative analysis".
- 49th International School and Conference on the Physics of Semiconductors 'Jaszowiec', September 2021, online; poster: "Effect of intrinsic and Rashba spin-orbit coupling on DOS in twisted bilayer graphene".
- 5th International Conference on Quantum Error Correction (QEC19), July-August 2019, London, UK; poster: "Estimation of gate fidelities for a MoS_2-monolayer spin-valley two-qubit system".
- International Conference on Quantum Technologies (ICQT 2019), July 2019, Moscow; poster: "Valley two-qubit system in a gated MoS_2-monolayer double quantum dot".
- EuroEcho Conference, December 2018, Mediolan, Italy; poster: "Development of mixed reality interactive visualization for three-dimensional echocardiography".
- Spin-Qubit 4, the 4th School and Conference on Spin-Based Quantum Information Processing, September 2018, Konstanz, Germany; poster: "Spin-valley two-qubit system in a gated MoS_2-monolayer quantum dot".
- QTech – Quantum Technology International Conference 2018, September 2018, Paris, France; poster: "Valley and spin qubits in 2D materials".
- ESC Congress 2018, August 2018, Munich, Germany; poster: "Searching for ultimate cardiac data display – Mixed reality interactive visualization of three-dimensional echocardiographic datasets".
- 43rd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, May 2018, Kraków, PL; poster: "Ultrafast spin initialization in electrostatic quantum dots".
- 22nd International Conference on Electronic Properties of Two Dimensional Systems (EP2DS-22) and 18th International Conference on Modulated Semiconductor Structures (MSS-18), July-August 2017, Penn State University, State College, USA; poster: "Spin and valley qubit in gated MoS_2 monolayer quantum dot".
- 46th, International School and Conference on the Physics of Semiconductors 'Jaszowiec', June 2017, Szczyrk, Poland; poster: "Valley qubit in gated MoS_2 monolayer quantum dot".
- 9th International Conference on Quantum Dots, May 2016, Jeju, South Korea; poster: "Generation of spin-dependent coherent states in a quantum wire".
- Spintech, 8th International School and Conference on Spintronics and Quantum Information Technology, August 2015, Basel, Switzerland; poster: "Electron spin rotations induced by oscillating Rashba interaction in quantum wires".

7.4. Współpraca z grupami badawczymi

- Współpraca z grupą prof. Pawła Hawrylaka z Uniwersytetu w Ottawie, Kanada. Współpraca zaowocowała pracami: [4, 5, 7, 9, 72]. Badania prowadzone są wspólnie z grupą eksperymentalną prof. Louisa Gaudreau, wspólne prace to: [5, 7, 72].
- Współpraca z grupą prof. J. Lucy Shi z University of Illinois Chicago, USA. Współpraca zaowocowała pracami: [6, 97].
- Współpraca z grupą eksperymentalną dr Dharmraja Kotekar-Patila i prof. Hugh O. Churchilla z University of Arkansas, USA. Współpraca zaowocowała pracą: [8].
- Współpraca z grupą prof. Katarzyny Roszak z Instytutu Fizyki Czeskiej Akademii Nauk w Pradze. Współpraca zaowocowała pracą [85].
- Współpraca z grupą prof. Marcina Szewczyka z Politechniki Warszawskiej i dr Kamila Kutorasińskiego z AGH. Współpraca zaowocowała pracami: [98, 99, 91, 100, 90].

7.5. Współpraca z przemysłem

- (**2022-2023**) Nanores [92], Ekspert ds. wizji komputerowej: opracowanie innowacyjnego algorytmu weryfikacji zabezpieczeń holograficznych z wykorzystaniem metod sztucznej inteligencji.

- (**2019-2022**) NeuroSYS [93], Deep Learning Researcher: przetwarzanie obrazów mikrobiologicznych przy użyciu tradycyjnych metod rozpoznawania obrazu, opracowanie systemu do automatycznego wykrywania i segmentacji mikroorganizmów przy użyciu głębokich sieci neuronowych, oraz opracowanie algorytmów do analizy chmur punktów ze skanerów 3D. Niektóre z tych systemów są obecnie wdrażane.
- (**2017-2019**) MedApp SA [101], Badacz: opracowanie systemu obrazowania medycznego 3D z wykorzystaniem gogli rozszerzonej rzeczywistości HoloLens, stworzenie systemu filtrowania obrazów echokardiograficznych, oraz opracowanie opartego na sztucznej inteligencji systemu wykrywania arytmii w sygnałach EKG. Rozwiązania te zostały z powodzeniem wdrożone jako część szerszych systemów.
- (**2013-2016**) Korporacyjne Centrum Badawcze ABB w Krakowie, Inżynier: modelowanie materiałów magnetycznych dla zastosowań elektroenergetycznych.

7.6. Nagrody

- Nagroda Rektora PW (2023).
- Nagroda Rektora PWr (2021,2022).
- Nagroda Secundus na Politechnice Wrocławskiej (2020).
- Stypendium Ministra Edukacji i Nauki dla wybitnych młodych naukowców (2019).
- Moderated Posters Awards na ESC Congress w Monachium (2018).

References

[1] J. Pawłowski, D. Żebrowski, and S. Bednarek, "Valley qubit in a gated MoS_2 monolayer quantum dot," Phys. Rev. B **97**, 155412 (2018).

[2] J. Pawłowski, "Spin-valley system in a gated MoS_2-monolayer quantum dot," New Journal of Physics **21**, 123029 (2019).

[3] J. Pawłowski, M. Bieniek, and T. Woźniak, "Valley two-qubit system in a MoS_2-monolayer gated double quantum dot," Phys. Rev. Appl. **15**, 054025 (2021).

[4] A. Altıntaş, M. Bieniek, A. Dusko, M. Korkusiński, J. Pawłowski, and P. Hawrylak, "Spin-valley qubits in gated quantum dots in a single layer of transition metal dichalcogenides," Phys. Rev. B **104**, 195412 (2021).

[5] J. Boddison-Chouinard, A. Bogan, P. Barrios, J. Lapointe, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Pawłowski, D. Miravet, M. Bieniek, P. Hawrylak, A. Luican-Mayer, and L. Gaudreau, "Anomalous conductance quantization of a one-dimensional channel in monolayer WSe_2," npj 2D Materials and Applications **7**, 50 (2023).

[6] J. Pawłowski, J. E. Tiessen, R. Dax, and J. Shi, "Electrical manipulation of valley qubit and valley geometric phase in lateral monolayer heterostructures," Phys. Rev. B **109**, 045411 (2024).

[7] J. Pawłowski, D. Miravet, M. Bieniek, M. Korkusinski, J. Boddison-Chouinard, L. Gaudreau, A. Luican-Mayer, and P. Hawrylak, "Interacting holes in a gated WSe_2 quantum channel: valley correlations and zigzag Wigner crystal," Phys. Rev. B **110**, 125147 (2024).

[8] J. Pawłowski, P. Kumar, K. Watanabe, T. Taniguchi, K. S. Novoselov, H. O. H. Churchill, and D. Kotekar-Patil, "Single electron quantum dot in two-dimensional transition metal dichalcogenides," (2024), arXiv:2402.19480 [cond-mat.mes-hall] .

[9] K. Sadecka, M. Bieniek, P. E. Faria Junior, A. Wójs, P. Hawrylak, and J. Pawłowski, "Electrically tunable valley couplings in $MoSe_2$/WSe_2 heterostructure," *Submitted to Phys. Rev. B* (2024).

[10] Y.-W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, "Energy gaps in graphene nanoribbons," Phys. Rev. Lett. **97**, 216803 (2006).

[11] S. Y. Zhou, G. H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D. H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and A. Lanzara, "Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene," Nature Materials **6**, 770–775 (2007).

[12] J. Hicks, A. Tejeda, A. Taleb-Ibrahimi, M. S. Nevius, F. Wang, K. Shepperd, J. Palmer, F. Bertran, P. Le Fèvre, J. Kunc, W. A. de Heer, C. Berger, and E. H. Conrad, "A wide-bandgap metal–semiconductor–metal nanostructure made entirely from graphene," Nature Physics **9**, 49–54 (2013).

[13] Y. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M. C. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, Y. R. Shen, and F. Wang, "Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene," Nature **459**, 820–823 (2009).

[14] S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O. V. Yazyev, and A. Kis, "2d transition metal dichalcogenides," Nature Reviews Materials **2**, 17033 (2017).

[15] A. Splendiani, L. Sun, Y. Zhang, T. Li, J. Kim, C.-Y. Chim, G. Galli, and F. Wang, "Emerging photoluminescence in monolayer MoS_2," Nano Letters **10**, 1271–1275 (2010).

[16] G.-B. Liu, W.-Y. Shan, Y. Yao, W. Yao, and D. Xiao, "Three-band tight-binding model for monolayers of group-vib transition metal dichalcogenides," Phys. Rev. B **88**, 085433 (2013).

[17] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and A. Jorio, *Group theory: application to the physics of condensed matter* (Springer Science & Business Media, Berlin Heidelberg, 2007).

[18] K. Kośmider, J. W. González, and J. Fernández-Rossier, "Large spin splitting in the conduction band of transition metal dichalcogenide monolayers," Phys. Rev. B **88**, 245436 (2013).

[19] A. Kormányos, V. Zólyomi, N. D. Drummond, and G. Burkard, "Spin-orbit coupling, quantum dots, and qubits in monolayer transition metal dichalcogenides," Phys. Rev. X **4**, 011034 (2014).

[20] D. Xiao, W. Yao, and Q. Niu, "Valley-contrasting physics in graphene: Magnetic moment and topological transport," Phys. Rev. Lett. **99**, 236809 (2007).

[21] W. Yao, D. Xiao, and Q. Niu, "Valley-dependent optoelectronics from inversion symmetry breaking," Phys. Rev. B **77**, 235406 (2008).

[22] D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng, X. Xu, and W. Yao, "Coupled spin and valley physics in monolayers of mos_2 and other group-vi dichalcogenides," Phys. Rev. Lett. **108**, 196802 (2012).

[23] Z. Gong, G.-B. Liu, H. Yu, D. Xiao, X. Cui, X. Xu, and W. Yao, "Magnetoelectric effects and valley-controlled spin quantum gates in transition metal dichalcogenide bilayers," Nature Communications **4**, 2053 (2013).

[24] T. LaMountain, H. Bergeron, I. Balla, T. K. Stanev, M. C. Hersam, and N. P. Stern, "Valley-selective optical stark effect probed by kerr rotation," Phys. Rev. B **97**, 045307 (2018).

[25] T. LaMountain, J. Nelson, E. J. Lenferink, S. H. Amsterdam, A. A. Murthy, H. Zeng, T. J. Marks, V. P. Dravid, M. C. Hersam, and N. P. Stern, "Valley-selective optical stark effect of exciton-polaritons in a monolayer semiconductor," Nature Communications **12**, 4530 (2021).

[26] X. Liu and M. C. Hersam, "2D materials for quantum information science," Nature Reviews Materials **4**, 669–684 (2019).

[27] K. E. J. Goh, F. Bussolotti, C. S. Lau, D. Kotekar-Patil, Z. E. Ooi, and J. Y. Chee, "Toward valley-coupled spin qubits," Advanced Quantum Technologies **3**, 1900123 (2020).

[28] J. F. Sierra, J. Fabian, R. K. Kawakami, S. Roche, and S. O. Valenzuela, "Van der waals heterostructures for spintronics and opto-spintronics," Nature Nanotechnology **16**, 856–868 (2021).

[29] D. Loss and D. P. DiVincenzo, "Quantum computation with quantum dots," Phys. Rev. A **57**, 120–126 (1998).
[30] N. Rohling and G. Burkard, "Universal quantum computing with spin and valley states," New Journal of Physics **14**, 083008 (2012).
[31] G. Széchenyi, L. Chirolli, and A. Pályi, "Impurity-assisted electric control of spin-valley qubits in monolayer MoS_2," 2D Materials **5**, 035004 (2018).
[32] N. Rohling, M. Russ, and G. Burkard, "Hybrid spin and valley quantum computing with singlet-triplet qubits," Phys. Rev. Lett. **113**, 176801 (2014).
[33] E. A. Laird, F. Pei, and L. P. Kouwenhoven, "A valley–spin qubit in a carbon nanotube," Nature Nanotechnology **8**, 565–568 (2013).
[34] D. Culcer, A. L. Saraiva, B. Koiller, X. Hu, and S. Das Sarma, "Valley-based noise-resistant quantum computation using si quantum dots," Phys. Rev. Lett. **108**, 126804 (2012).
[35] L. Banszerus, K. Hecker, L. Wang, S. Möller, K. Watanabe, T. Taniguchi, G. Burkard, C. Volk, and C. Stampfer, "Phonon-limited valley life times in single-particle bilayer graphene quantum dots," (2024), arXiv:2402.16691 [cond-mat.mes-hall] .
[36] R. Garreis, C. Tong, J. Terle, M. J. Ruckriegel, J. D. Gerber, L. M. Gächter, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Ihn, K. Ensslin, and W. W. Huang, "Long-lived valley states in bilayer graphene quantum dots," Nature Physics **20**, 428–434 (2024).
[37] R. Roldán, M. P. López-Sancho, F. Guinea, E. Cappelluti, J. A. Silva-Guillén, and P. Ordejón, "Momentum dependence of spin–orbit interaction effects in single-layer and multi-layer transition metal dichalcogenides," 2D Materials **1**, 034003 (2014).
[38] K. Kaasbjerg, "Atomistic *t*-matrix theory of disordered two-dimensional materials: Bound states, spectral properties, quasiparticle scattering, and transport," Phys. Rev. B **101**, 045433 (2020).
[39] R. Pisoni, Z. Lei, P. Back, M. Eich, H. Overweg, Y. Lee, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Ihn, and K. Ensslin, "Gate-tunable quantum dot in a high quality single layer MoS2 van der Waals heterostructure," Applied Physics Letters **112**, 123101 (2018).
[40] J. Boddison-Chouinard, A. Bogan, N. Fong, K. Watanabe, T. Taniguchi, S. Studenikin, A. Sachrajda, M. Korkusinski, A. Altintas, M. Bieniek, P. Hawrylak, A. Luican-Mayer, and L. Gaudreau, "Gate-controlled quantum dots in monolayer WSe2," Applied Physics Letters **119**, 133104 (2021).
[41] S. Davari, J. Stacy, A. Mercado, J. Tull, R. Basnet, K. Pandey, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Hu, and H. Churchill, "Gate-defined accumulation-mode quantum dots in monolayer and bilayer wse_2," Phys. Rev. Appl. **13**, 054058 (2020).
[42] R. Krishnan, S. Biswas, Y.-L. Hsueh, H. Ma, R. Rahman, and B. Weber, "Spin-valley locking for in-gap quantum dots in a mos2 transistor," Nano Letters **23**, 6171–6177 (2023).
[43] R. Jozsa and N. Linden, "On the role of entanglement in quantum-computational speed-up," Proceedings: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **459**, 2011–2032 (2003).
[44] P. W. Shor, "Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory," Phys. Rev. A **52**, R2493–R2496 (1995).
[45] D. P. DiVincenzo, "The physical implementation of quantum computation," Fortschritte der Physik: Progress of Physics **48**, 771–783 (2000).
[46] A. Barenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. A. Smolin, and H. Weinfurter, "Elementary gates for quantum computation," Phys. Rev. A **52**, 3457–3467 (1995).
[47] F. Arute *et al.*, "Quantum supremacy using a programmable superconducting processor," Nature **574**, 505–510 (2019).
[48] J. Y. Huang *et al.*, "High-fidelity spin qubit operation and algorithmic initialization above 1 k," Nature **627**, 772–777 (2024).
[49] G. Burkard, T. D. Ladd, A. Pan, J. M. Nichol, and J. R. Petta, "Semiconductor spin qubits," Rev. Mod. Phys. **95**, 025003 (2023).
[50] J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao, and X. Xu, "Valleytronics in 2d materials," Nature Reviews Materials **1**, 16055 (2016).

[51] M. S. M. Saifullah, M. Asbahi, D. C. J. Neo, Z. Mahfoud, H. R. Tan, S. T. Ha, N. Dwivedi, T. Dutta, S. bin Dolmanan, Z. Aabdin, M. Bosman, R. Ganesan, S. Tripathy, D. G. Hasko, and S. Valiyaveettil, "Patterning at the resolution limit of commercial electron beam lithography," Nano Letters **22**, 7432–7440 (2022).

[52] E. N. Osika, A. Mreńca, and B. Szafran, "Tight-binding simulations of electrically driven spin-valley transitions in carbon nanotube quantum dots," Phys. Rev. B **90**, 125302 (2014).

[53] https://www.nextnano.com/nextnano3/tutorial/1Dtutorial_SchroedingerPoisson.htm (2015), accessed: 2024-09-30.

[54] A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, "Valley filter and valley valve in graphene," Nature Physics **3**, 172–175 (2007).

[55] O. Ávalos Ovando, D. Mastrogiuseppe, and S. E. Ulloa, "Lateral heterostructures and one-dimensional interfaces in 2d transition metal dichalcogenides," Journal of Physics: Condensed Matter **31**, 213001 (2019).

[56] J. Kang, S. Tongay, J. Zhou, J. Li, and J. Wu, "Band offsets and heterostructures of two-dimensional semiconductors," Applied Physics Letters **102**, 012111 (2013).

[57] W. Wei, Y. Dai, and B. Huang, "In-plane interfacing effects of two-dimensional transition-metal dichalcogenide heterostructures," Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 15632–15638 (2016).

[58] M. V. Berry, "Quantal phase factors accompanying adiabatic changes," Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences **392**, 45–57 (1984).

[59] F. Wilczek and A. Zee, "Appearance of gauge structure in simple dynamical systems," Phys. Rev. Lett. **52**, 2111–2114 (1984).

[60] P. San-Jose, G. Schön, A. Shnirman, and G. Zarand, "Spin dephasing due to a random berry phase," Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **40**, 76–83 (2007).

[61] S. Bednarek, J. Pawlowski, and A. Skubis, "Manipulation of a single electron spin in a quantum dot without magnetic field," Applied Physics Letters **100**, 203103 (2012).

[62] N. D. Mermin, *Quantum Computer Science: An Introduction* (Cambridge University Press, 2007).

[63] L. Banszerus, S. Möller, K. Hecker, E. Icking, K. Watanabe, T. Taniguchi, F. Hassler, C. Volk, and C. Stampfer, "Particle–hole symmetry protects spin-valley blockade in graphene quantum dots," Nature **618**, 51–56 (2023).

[64] F. Pei, E. A. Laird, G. A. Steele, and L. P. Kouwenhoven, "Valley–spin blockade and spin resonance in carbon nanotubes," Nature Nanotechnology **7**, 630–634 (2012).

[65] L. P. Kouwenhoven, G. Schön, and L. L. Sohn, "Introduction to mesoscopic electron transport," in *Mesoscopic Electron Transport*, edited by L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven, and G. Schön (Springer Netherlands, Dordrecht, 1997) pp. 1–44.

[66] G. Giuliani and G. Vignale, *Quantum theory of the electron liquid* (Cambridge university press, 2008).

[67] C. Attaccalite, S. Moroni, P. Gori-Giorgi, and G. B. Bachelet, "Correlation energy and spin polarization in the 2D electron gas," Phys. Rev. Lett. **88**, 256601 (2002).

[68] A. D. Güçlü, C. J. Umrigar, H. Jiang, and H. U. Baranger, "Localization in an inhomogeneous quantum wire," Phys. Rev. B **80**, 201302 (2009).

[69] J. S. Meyer and K. A. Matveev, "Wigner crystal physics in quantum wires," Journal of Physics: Condensed Matter **21**, 023203 (2008).

[70] K. A. Matveev, "Conductance of a quantum wire in the Wigner-crystal regime," Phys. Rev. Lett. **92**, 106801 (2004).

[71] S. Kumar, M. Pepper, S. N. Holmes, H. Montagu, Y. Gul, D. A. Ritchie, and I. Farrer, "Zero-magnetic field fractional quantum states," Phys. Rev. Lett. **122**, 086803 (2019).

[72] J. Boddison-Chouinard, M. Korkusinski, A. Bogan, P. Barrios, P. Waldron, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Pawłowski, D. Miravet, P. Hawrylak, A. Luican-Mayer, and L. Gaudreau, "Valley-spin polarization at zero magnetic field induced by strong hole-hole interactions in monolayer wse_2," (2024), arXiv:2410.11653 [cond-mat.mes-hall] .

[73] Y. Gong, S. Lei, G. Ye, B. Li, Y. He, K. Keyshar, X. Zhang, Q. Wang, J. Lou, Z. Liu, R. Vajtai, W. Zhou, and P. M. Ajayan, "Two-step growth of two-dimensional WSe2/MoSe2 heterostructures," Nano Letters **15**, 6135–6141 (2015).
[74] A. Niebur, T. Lorenz, M. Schreiber, G. Seifert, S. Gemming, and J.-O. Joswig, "Localization of edge states at triangular defects in periodic Mos_2 monolayers," Phys. Rev. Mater. **5**, 064001 (2021).
[75] J. Pawłowski, P. Szumniak, and S. Bednarek, "Electron spin rotations induced by oscillating Rashba interaction in a quantum wire," Phys. Rev. B **93**, 045309 (2016).
[76] J. Pawłowski, P. Szumniak, and S. Bednarek, "Generation of spin-dependent coherent states in a quantum wire," Phys. Rev. B **94**, 155407 (2016).
[77] J. Pawłowski, M. Górski, G. Skowron, and S. Bednarek, "Generation of schrödinger cat type states in a planar semiconductor heterostructure," Phys. Rev. B **96**, 115308 (2017).
[78] S. Bednarek, J. Pawłowski, M. Górski, and G. Skowron, "All-electric single electron spin initialization," New Journal of Physics **19**, 123006 (2017).
[79] J. Pawłowski, G. Skowron, M. Górski, and S. Bednarek, "All-electric single-electron spin-to-charge conversion," Phys. Rev. B **98**, 125411 (2018).
[80] S. Bednarek, J. Pawłowski, M. Górski, and G. Skowron, "Ultrafast spin initialization in a gated InSb nanowire quantum dot," Phys. Rev. Appl. **11**, 034012 (2019).
[81] J. Pawłowski, G. Skowron, P. Szumniak, and S. Bednarek, "Spin-selective resonant tunneling induced by Rashba spin-orbit interaction in semiconductor nanowire," Phys. Rev. Appl. **15**, 054066 (2021).
[82] I. Bengtsson and K. Zyczkowski, *Geometry of Quantum States: An Introduction to Quantum Entanglement* (Cambridge University Press, 2006).
[83] P. Horodecki, "Separability criterion and inseparable mixed states with positive partial transposition," Physics Letters A **232**, 333–339 (1997).
[84] J. Pawłowski and M. Krawczyk, "Identification of quantum entanglement with siamese convolutional neural networks and semisupervised learning," Phys. Rev. Appl. **22**, 014068 (2024).
[85] M. Krawczyk, J. Pawłowski, M. M. Maśka, and K. Roszak, "Data-driven criteria for quantum correlations," Phys. Rev. A **109**, 022405 (2024).
[86] S. Majchrowska, J. Pawłowski, G. Guła, T. Bonus, A. Hanas, A. Loch, A. Pawlak, J. Roszkowiak, T. Golan, and Z. Drulis-Kawa, "Agar a microbial colony dataset for deep learning detection," (2021), arXiv:2108.01234 [cs.CV] .
[87] J. Pawłowski, S. Majchrowska, and T. Golan, "Generation of microbial colonies dataset with deep learning style transfer," Scientific Reports **12**, 5212 (2022).
[88] K. M. Graczyk, J. Pawłowski, S. Majchrowska, and T. Golan, "Self-normalized density map (sndm) for counting microbiological objects," Scientific Reports **12**, 10583 (2022).
[89] C. Bukas, F. Albrecht, M. S. Ur- Rehman, D. Popek, M. Patalan, J. Pawłowski, B. Wecker, K. Landsch, T. Golan, T. Kowalczyk, M. Piraud, and S. S. Ende, "Robust deep learning based shrimp counting in an industrial farm setting," Journal of Cleaner Production **468**, 143024 (2024).
[90] P. Leszczynski, K. Kutorasinski, M. Szewczyk, and J. Pawłowski, "Machine-learned models for power magnetic material characteristics," IEEE Transactions on Power Electronics , 1–9 (2024).
[91] J. Pawłowski, K. Kutorasiński, and M. Szewczyk, "Multifrequency nonlinear model of magnetic material with artificial intelligence optimization," Scientific Reports **12**, 19784 (2022).
[92] https://lab.nanores.pl, accessed: 2024-09-30.
[93] https://neurosys.com/rd, accessed: 2024-09-30.
[94] http://www.isd.fis.agh.edu.pl/materialy_z_warsztatow.php, Proceedings of the ISD Workshops, editors M. Perzanowski, J. Pawłowski, M. Chrobak, and J. Moroń, Faculty of Physics and Applied Computer Science, AGH University of Science and Technology, Kraków, 2013.
[95] https://github.com/jarek-pawlowski/deep-learning-workshops (2023), accessed: 2024-09-30.
[96] https://jarek-pawlowski.github.io/MLA2024/ (2024), accessed: 2024-09-30.

[97] J. E. Tiessen, J. Pawlowski, R. Dax, and J. L. Shi, "Extensible gauge-invariant fdm with spin–orbit coupling for quantum devices," IEEE Transactions on Quantum Engineering **4**, 1–8 (2023).

[98] M. Szewczyk, J. Pawłowski, K. Kutorasiński, W. Piasecki, M. Florkowski, and U. Straumann, "High-frequency model of magnetic rings for simulation of vfto damping in gas-insulated switchgear with full-scale validation," IEEE Transactions on Power Delivery **30**, 2331–2338 (2015).

[99] M. Szewczyk, K. Kutorasiński, J. Pawłowski, W. Piasecki, and M. Florkowski, "Advanced modeling of magnetic cores for damping of high-frequency power system transients," IEEE Transactions on Power Delivery **31**, 2431–2439 (2016).

[100] K. Kutorasiński, J. Pawłowski, P. Leszczyński, and M. Szewczyk, "Nonlinear modeling of magnetic materials for circuit simulations," Scientific Reports **13**, 17178 (2023).

[101] https://medapp.pl/, accessed: 2024-09-30.