

Prof. dr hab. Jacek Dziarmaga
Instytut Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Jagiellońskiego
ul. Prof. Stanisława Łojasiewicza 11
30-348 Kraków
e-mail: jacek.dziarmaga@uj.edu.pl

9 sierpnia 2025

Ocena rozprawy doktorskiej pani magister Katarzyny Sadeckiej pt.
Optical Properties of Correlated Electrons in Two-Dimensional Crystals.

Przedstawiona rozprawa opisuje problem własności optycznych skorelowanych elektronów w dwuwymiarowych kryształach, a w szczególności kropek kwantowych i ekscytonów. Jest bardzo spójna tematycznie zarówno pod względem stosowanych metod obliczeniowych, jak i rozważanych zagadnień fizycznych. Rozprawa opiera się na siedmiu publikacjach w czasopismach recenzowanych. Większość publikacji jest w bardzo solidnych czasopismach takich jak Physical Review B czy Nanomaterials. Na ich tle wyróżnia się publikacja w bardzo wpływowym Nano Letters. Dodatkowo rozprawa zawiera materiał z dwu manuskryptów w przygotowaniu. Prace mają zwykle od czterech do sześciu autorów. Pani Sadecka jest pierwszym autorem w trzech spośród nich a drugim autorem w dwóch dalszych. Wkład doktorantki jest istotny także w tych dwóch pracach, gdzie jej nazwisko zajmuje czwarte miejsce na liście autorów. Ze względu na złożoność obliczeń oczekiwałam, że publikacje nie są sumą prostą przyczynków poszczególnych autorów, gdyż wiele elementów wymaga równoległego sprawdzenia przez współpracowników.

Otrzymawszy tą rozprawę do recenzji byłem w pierwszej chwili przytłoczony objętością prawie 160 stron niemal pozbawionych marginesów. Obawiałem się także bardzo hermetycznego wywodu z dużą liczbą akronimów w pełni zrozumiałych jedynie dla specjalistów. Jednak już pobieżne przejrzanie zawartości rozwiało te obawy. Dokładnie połowa objętości to staranne wprowadzenie najpierw w stan badań nad materiałami dwuwymiarowymi, a następnie krok po kroku w stosowane metody teoretyczne i obliczeniowe. Gdy w końcu w drugiej połowie rozprawy, prezentującej uzyskane wyniki, pojawiają się oczekiwane akronimy, to sprawiają one miłe wrażenie starych dobrych znajomych. Ze względu na to obszerne wprowadzenie umieszczę tą rozprawę nie wśród innych zakurzonych prac studenckich, ale na specjalnej półce z ulubionymi podręcznikami.

Na recenzencie spoza prezentowanej tematyki nie może nie zrobić wrażenia ogromna złożoność obliczeniowa rozważanych zagadnień, których opis teoretyczny ma kilka pięter od mikroskopowych metod ab initio do wynikających z nich modeli efektywnych, które w końcu sprowadzają złożoność obliczeniową to poziomu akceptowalnego przez dzisiejsze komputery. Na każdym etapie tego procesu wymagana jest ogromna precyzja, żeby końcowy rezultat miał w ogóle szanse przypominać wyniki jakiegokolwiek eksperymentu. To że tak w końcu się dzieje zakrawa na cud, który od lat wprawia mnie w nieustające zdumienie.

Rozliczne przykłady przedstawione w pracy pokazują, że własności optyczne rozważanych układów silnie zależą od manipulacji jakim te układy mogą być poddawane. Daje to nadzieję na skuteczną funkcjonalizację tych dwuwymiarowych materiałów, w przeciwieństwie do grafenu który wzbudził powszechne nadzieje, których jednak nie udało się spełnić z powodów przedstawionych w pracy.

Analiza tych przykładów nie byłaby możliwa bez systematycznego postępu w metodach teoretycznych. Moim zdaniem na szczególną uwagę zasługuje wkład doktorantki uogólnienie modelu ciasnego wiązania uwzględniające sprzężenie spin-orbita, rozszczepienie dolinowe, czy oddziaływania międzywarstwowe. Drugim ważnym wkładem jest uogólnienie formalizmu pA tak, aby uwzględnić pola magnetyczne, czy wyprowadzenie w tych ramach zasad wyboru na sieci heksagonalnej.

Rozprawę przeczytałem z przyjemnością. Lektura nasunęła mi szereg pytań i komentarzy. Oto niektóre z nich:

- 1) Rozważane problemy są złożone obliczeniowo. Rozprawa dużo uwagi poświęca kwestii jak tę złożoność ograniczyć, ale nie znalazłem informacji na jakich maszynach ostatecznie te obliczenia są wykonywane. Czy istnieją w literaturze algorytmy kwantowe, które mogłyby być pomocne.
- 2) Kilkakrotnie w rozprawie wspomina się o potencjalnych zastosowaniach badanych zjawisk w kwantowej informatyce. Ponieważ ta motywacja jest dość powszechnie przywoływana w dzisiejszej fizyce, chciałbym poprosić o bardziej konkretne przykłady, jak można by je zaprząć do obliczeń kwantowych. Na przykład jakie układy mogłyby służyć jako kubity, jaki byłby czas dekoherencji takiego kubitu?
- 3) Czy ze złotej reguły Fermiego (3.51) można otrzymać czas spontanicznej emisji? Jakiego rzędu są to czasy i jak wypada ich porównanie ze skalą czasową, na której można wykonywać operacje na tych układach?
- 4) Obrazek 3.7 przedstawia przykładowe dyskretne spektrum poziomów energetycznych. W jaki sposób ze złotej reguły Fermiego (3.51), zawierającej deltę Diraca, uzyskuje się skończone szerokości linii przedstawionych na obrazkach 3.8 i 3.9? Czy te szerokości zostały wprowadzone ręcznie, czy może zostały uzyskane samokonsystentnie na podstawie czasu życia poszczególnych poziomów?
- 5) Rozdział 4.4.2 rozważa magnetoekscytony w całkowicie wypełnionym najniższym poziomie Landaua. Czy miałoby sens rozważanie ułamkowego wypełnienia, tudzież ułamkowego kwantowego efektu Halla stabilizowanego przez ekranowane oddziaływanie kulombowskie?

Będę wdzięczny za ustosunkowanie się do powyższych pytań i komentarzy, ale muszę podkreślić, że ich ilość nie ma na celu umniejszenia mojej wysokiej oceny prezentowanej pracy, a wręcz przeciwnie jest wyrazem żywego zainteresowania.

W świetle przepisów wyróżnienie rozprawy można skutecznie zaproponować jedynie na etapie recenzji, chociaż właściwsze i bardziej taktowne byłoby odłożenie tej decyzji na dyskusję po obronie. Świetna rozprawa doktorska pani magister Katarzyny Sadeckiej nie tylko spełnia wszystkie wymogi stawiane tego typu pracom, co pozwala mi wnioskować o dopuszczenie pani Sadeckiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego, ale także potencjalnie zasługuje na wyróżnienie. Powodem jest ogromny rozmach badań w bardzo aktualnej dziedzinie, udokumentowany znaczącym dorobkiem publikacyjnym w bardzo dobrych czasopiśmie, gruntowne opanowanie wszystkich aspektów bardzo złożonych metod obliczeniowych, a przede wszystkim jej osobisty wkład w rozwój metod teoretycznych.

Z poważaniem,

Jacek Dziarmaga