

Autoreferat

Michał Wierzbicki
Politechnika Warszawska
Wydział Fizyki

magister inżynier nauk fizycznych

Analiza fraktalna stanów chaosu deterministycznego, praca magisterska wykonana w 1994 roku na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Warszawskiej pod kierunkiem prof. dr hab. Jacka Żebrowskiego

doktor nauk fizycznych

Zjawiska optyczne w supersiatkach o spiralnym uporządkowaniu magnetycznym, praca doktorska wykonana w 1998 roku na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej pod kierunkiem prof. dr hab. Jerzego Kocińskiego

zatrudniony na stanowisku adiunkta na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej od maja 1999 roku

Za osiągnięcie wynikające z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. 2017 r. Poz. 1789) uważam cykl **13** publikacji naukowych na temat:

Efekty termoelektryczne w niskowymiarowych układach kwantowych

Wstęp

Efekty termoelektryczne pozwalają zamienić energię cieplną na użyteczną energię mechaniczną w postaci prądu elektrycznego i spinowego.

Maksymalna sprawność procesów zamieniających nieuporządkowany ruch molekuł na pracę mechaniczną została określona przez Sadi Carnota (1824) i zrealizowana wcześniej w postaci silnika parowego (Newcomen 1712), a później spalinowego (Lenoir 1860). Dalsze odkrycia Thomasa Johanna Seebecka (1821) i Jeana Charlesa Peltiera (1834) wykazały możliwość bezpośredniej generacji energii

elektrycznej, z pominięciem zamiany energii mechanicznej na elektryczną przez prądnicę. Do niedawna efekty te były traktowane raczej jako ciekawostka fizyczna, a ich praktyczną użyteczność ograniczała niska sprawność klasycznych złącz bimetalicznych (5 do 8%), znajdujących zastosowanie jedynie w metrologii jako termopara. Wraz ze wzrostem poziomu współczesnej technologii stała się możliwa produkcja układów realizujących efektywną konwersję bezużytecznego ciepła (ang. *waste heat*) na użyteczną energię elektryczną.

W ostatnich latach wykazano przy użyciu nowych narzędzi nanotechnologicznych, że znaczne zwiększenie wydajności efektów termoelektrycznych można uzyskać przez zastosowanie materiałów o obniżonej wymiarowości. Tego typu układy posiadają piki typu delty Diraca w gęstości stanów oraz cechuje je mały wkład fononów do przewodnictwa cieplnego, co prowadzi do znacznych odchyleń od klasycznego prawa Wiedemanna-Franza rządzącego przewodnictwem cieplnym i elektrycznym zwykłych metali. Do zrozumienia natury zjawisk termoelektrycznych w tego typu układach niezbędna jest nie tylko termodynamika fenomenologiczna, ale także mechanika kwantowa, a w szczególności kwantowa teoria wielu ciał. Analiza kwantowego zachowania się takich układów wymagana jest także przy projektowaniu realnych urządzeń w skali nano, mających spełniać zadane parametry wydajności termoelektrycznej.

* * *

Warto zwrócić uwagę, że użyteczność efektów termoelektrycznych określają dwa różne parametry:

- sprawność η (ang. *efficiency*) czyli stosunek uzyskanej energii elektrycznej W do zużytej energii cieplnej Q :
$$\eta = W / Q,$$
- wydajność ZT (ang. *figure of merit*), będąca bezwymiarową kombinacją temperatury T , współczynnika efektu Seebecka S oraz współczynników przewodnictwa cieplnego κ i elektrycznego G :
$$ZT = G \cdot S^2 \cdot T / \kappa.$$

W pracach na temat efektów termoelektrycznych często temperaturę podaje się w milielektronowoltach. Należy pamiętać, że $1 \text{ meV} = 10^{-3} e/k = 11,6$ Kelwinów, gdzie e jest ładunkiem elementarnym, a k stałą Boltzmanna.

* * *

Uzasadnienie wyboru tematyki naukowej

W swoich badaniach naukowych zająłem się dwiema kategoriami układów niskowymiarowych w zastosowaniu do zjawisk termoelektrycznych:

- kropkami kwantowymi, czyli układami zerowymiarowymi,
- układami jednowymiarowymi w postaci tak zwanych nanowstążek, opartych na dwuwymiarowych materiałach typu grafenu, o heksagonalnej strukturze ułożenia atomów, zbudowanych z atomów C, Si, Ge, Sn z czwartej kolumny układu okresowego pierwiastków.

Do opisu tych układów użyłem modelowych hamiltonianów drugiego kwantowania, znacznie upraszczających opis własności obiektów kwantowych. Mimo, że mówimy o skali nano, to jednak w realnych urządzeniach mamy do czynienia często z tysiącami atomów. Podejście modelowe pozwala w sposób przybliżony opisać zachowanie się tego typu układów, a co najważniejsze daje możliwość zrozumienia istoty fizycznej procesów w nich zachodzących. Drugim możliwym sposobem wyznaczania własności złożonych układów kwantowych są obliczenia ab-initio, oparte o metodę funkcjonału gęstości. Moim zdaniem obie te metody wzajemnie się uzupełniają. Metoda ab-initio pozwala otrzymać wyniki ilościowo zgodne z eksperymentem, a metoda modelowa daje jakościowy opis zachowania się badanego układu pozwalający na interpretację fizyczną mechanizmów rządzących procesami kwantowymi. Aby uzyskać zgodność ilościową modelu z rzeczywistością dobiera się jego parametry na podstawie wyników obliczeń ab-initio lub pomiarów eksperymentalnych. Warto wspomnieć, że modelowy opis struktury grafenu podany przez D. Haldane'a został uhonorowany nagrodą Nobla w 2016 roku.

Jednym z badanych przeze mnie efektów jest efekt magnetorezystancji tunelowej, czyli zależność oporu elektrycznego związanego z tunelowaniem elektronu przez badaną strukturę od zewnętrznego pola magnetycznego lub magnetycznej konfiguracji elektrod. Klasyczną magnetorezystancję odkrył William Thomson (Lord Kelvin) w 1856 roku. O aktualności naukowej badań magnetorezystancji nanostruktur świadczy Nagroda Nobla nadana w 2007 dla Alberta Fert'a i Petera Grünberga za odkrycie gigantycznej (ang. *giant*) magnetorezystancji.

Do analizy własności kropek kwantowych i nanowstążek użyłem jednej z metod kwantowej teorii wielu ciał – metody nierównowagowych funkcji Greena. Jest to bardzo elegancka metoda pozwalająca w prosty sposób uzyskać parametry fizyczne badanego układu. W pewnych przypadkach, aby otrzymać poglądowy opis transmisji elektronów przez rozważaną strukturę, zastosowałem metodą dopasowania funkcji falowych znaną z elementarnej mechaniki kwantowej i równoważną funkcjom Greena.

Ważną rolę w wynikach moich badań odgrywają efekty spinowe, związane z transportem spinu elektronu, wydzielone obecnie w odrębną gałąź wiedzy zwaną *spintroniką*. Dodatkowy spinowy stopień swobody powoduje, że większość efektów termoelektrycznych można rozpatrywać w dwu postaciach: konwencjonalnej i spinowej. Spinowy efekt Seebecka, czyli generacja napięcia spinowego w termozłączu został po raz pierwszy zaobserwowany doświadczalnie przez K. Uchidę i S. Takahashiego w 2008 roku, w *Nature* **455** (2008) 778. Spin elektronu w połączeniu z oddziaływaniem kulombowskim daje możliwość uzyskania struktur magnetycznych, a co za tym następnego stopnia

swobody układu jakim jest uporządkowanie magnetyczne.

W niżej opisanych pracach dotyczących nanowstążek grafenowych i silicenowych pojawiają się także odniesienia do bardzo aktualnego i nagrodzonego w 2016 roku nagrodą Nobla tematu topologicznych przemian fazowych, związanych z występowaniem przewodzących stanów krawędziowych w materiale, który w całości nie przewodzi prądu elektrycznego. W moich pracach stany krawędziowe związane są z magnetyzmem krawędziowym, czyli z występowaniem niezerowego momentu magnetycznego atomów znajdujących się na krawędzi badanej struktury.

* * *

Omówienie poszczególnych publikacji wchodzących w skład wniosku habilitacyjnego

Poniżej podaję szczegółowe omówienie tematów i celu naukowego poszczególnych publikacji, które włączyłem do wniosku habilitacyjnego. Zostały one uszeregowane w porządku chronologicznym. Większość z nich wykonałem we współpracy z Panią Profesor Renatą Świrkowicz z Wydziału Fizyki Politechniki Warszawskiej. Część z nich była realizowana w ramach grantu Narodowego Centrum Nauki pt. „Spinowe efekty termoelektryczne w transporcie przez układy nanoskopowe”, kierowanego przez prof. dr hab. Józefa Barnasia z Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu.

Muszę podkreślić, że wyniki zamieszczone w poniższych pracach zostały otrzymane przeze mnie za pomocą zestawu programów numerycznych, które napiisałem własnoręcznie i nie opierają się na gotowych pakietach obliczeniowych z fizyki ciała stałego. Obliczenia zostały wykonane na rozproszonym klastrze obliczeniowym Zakładu Badań Strukturalnych Wydziału Fizyki PW, którego jestem twórcą i administratorem.

Określenie własności termoelektrycznych układów niskowymiarowych wymaga znajomości współczynnika transmisji elektronowej. Jest on równy prawdopodobieństwu przejścia elektronu o danej energii przez badaną strukturę pomnożonemu przez liczbę możliwych dróg propagacji. Współczynnik transmisji $T(E)$ dla układów niskowymiarowych jest zazwyczaj bardzo skomplikowaną funkcją energii. Aby na jego podstawie obliczyć współczynniki termoelektryczne, a następnie dokonywać uzasadnionej fizycznej interpretacji wyników należy bardzo dokładnie obliczać wyrażenia całkowite zawierające pochodne rozkładu Fermiego-Diraca. W moich programach wyznaczałem numerycznie wszystkie punkty nieciągłości współczynnika transmisji, a następnie stosowałem aproksymację wielomianową dla przedziałów ciągłości $T(E)$. Dokładne obliczenie całek niewłaściwych zawierających rozkłady typu Fermiego-Diraca wymagało zastosowania szybkiego algorytmu z matematycznej biblioteki ACM (<http://dl.acm.org>). Mogę więc twierdzić, że wyniki obliczeń

dotyczących efektów termoelektrycznych przedstawione w moich pracach są wiarygodne.

Do otrzymania współczynników termoelektrycznych w pracach dotyczących nanowstążek typu grafenowego zrezygnowałem z zastosowania metody nierównowagowych funkcji Greena. Jest ona bardzo elegancka, ale nie daje wglądu w fizyczny mechanizm procesów zachodzących w materiałach niskowymiarowych. W mojej opinii, pewna część badaczy traktuje metodę funkcji Greena jako „czarną skrzynkę”, z której wyciąga interesujące parametry działania układu za pomocą magicznych formuł. Ponieważ transmisja elektronów przez badaną strukturę tak naprawdę polega na propagacji i rozpraszaniu fal de Broglie'a, do obliczenia współczynnika transmisji nanowstążek postanowiłem zastosować metodę dopasowania funkcji falowych (ang. *wave-matching technique* WMT), znaną z elementarnej mechaniki kwantowej. Zastosowanie metody WMT do obliczania własności nanostruktur zaproponowali M. Zwierzycki i P.A. Khomyakov w *Phys. Stat. Solidi B* **245** (2008) 623-640. Aby spełnić zasadę zachowania energii na granicy nieskończonej elektrody i analizowanego elementu niskowymiarowego trzeba uwzględnić nie tylko fale odbite i transmitowane, ale także fale zanikające (ang. *evanescent waves*). Formalnie z matematycznego punktu widzenia metoda WMT jest równoważna funkcjom Greena.

Należy podkreślić, że wartość naukowa niżej opisanych prac nie polega głównie na dużej ilości dokładnych wyników numerycznych w postaci wykresów. Najważniejsza jest w nich interpretacja fizyczna otrzymanych rezultatów czyli wyjaśnienie przyczyny takiego, a nie innego zachowania się badanego układu. Niżej podane opisy prac wchodzących w skład zgłoszenia habilitacyjnego są oczywiście ograniczone ze względu na rozmiar autoreferatu. Dla każdego z cytowanych wyników można natomiast znaleźć w oryginalnym tekście pracy szczegółowe uzasadnienie fizyczne uzyskanych rezultatów.

Określenie mechanizmu działania układów kwantowych o dużym stopniu złożoności (mimo zastosowanych uproszczeń i modeli) jest często znacznie trudniejsze niż ułożenie i rozwiązanie matematycznych równań. Jest to spowodowane dużym stopniem korelacji między-elektronowej, a co za tym idzie silną nieliniowością takich układów. Bez zrozumienia fizycznej istoty rzeczy zdani będziemy jedynie na ogromne moce obliczeniowe współczesnych komputerów. Wykonując tysiące rachunków metodą funkcjonału gęstości można w końcu trafić na materiał o pożądanym własnościach. Przykładem takiego działania jest „The Materials Project” <https://materialsproject.org>. Jako historyczną analogię różnicy podejścia do badań naukowych można podać sylwetki Edisona i Faradaya. Pierwszy wykonywał tysiące eksperymentów licząc na szczęśliwy traf, drugi dążył do zrozumienia istoty przyrody. Osobiście stoję po stronie Faradaya.

* * *

1. R. Świrkowicz, M. Wierzbicki, J. Barnaś, „Thermoelectric effects in transport through quantum dots attached to ferromagnetic leads with noncollinear magnetic moments”, *Physical Review* **B 80**, (2009) 195409, impact factor = 3,475

W pracy zbadano efekty termoelektryczne w jednopoziomowej kropce kwantowej sprzężonej z ferromagnetycznymi elektrodami, których magnetyzacja może być nachylona pod kątem do osi kwantyzacji kropki kwantowej. Został zastosowany modelowy hamiltonian drugiego kwantowania uwzględniający oddziaływanie kulombowskie dwóch elektronów o przeciwnych spinach obsadzających poziom kwantowy kropki. Wzięto także pod uwagę asymetryczne sprzężenie kropki z elektrodami, to znaczy różny stopień sprzężenia dla dwóch różnych kanałów spinowych, opisany za pomocą parametru polaryzacji spinowej. Macierz transmisji układu została obliczona przy użyciu nierównowagowych funkcji Greena, w oparciu o metodę równań ruchu i przybliżenie Hartree-Focka. Rozwiązano równanie Dysona dla funkcji Greena zależnej od energii, a następnie z równania Kiełdysza otrzymano mniejszościową funkcję Greena przy użyciu wzoru Ng-Lee. Główne wyniki pracy są następujące:

- Wyznaczono parametry termoelektryczne takie jak: przewodnictwo cieplne, współczynnik Seebecka i wydajność termoelektryczną w zależności od wartości poziomu energetycznego kropki dla różnych stopni polaryzacji spinowych.
- Znalaziono maksima przewodnictwa cieplnego jako funkcji poziomu kropki i kąta między magnetyzacjami elektrod i osią kwantyzacji kropki.
- Określono siłę magnetotermoelektryczną, czyli względną zmianę efektu Seebecka przy zmianie magnetyzacji elektrod od konfiguracji równoległej do anty-równoległej.
- Podano maksima współczynnika wydajności termoelektrycznej układu dla różnych wartości polaryzacji spinowej.
- Określono spinowy współczynnik efektu Seebecka w zależności od położenia poziomu energetycznego kropki kwantowej i wartości polaryzacji spinowej.

Zbadano także pracę układu w obszarze nieliniowym dla dużej różnicy temperatur między elektrodami, stosując formułę Meira przy warunku zerowania się prądu ładunkowego (lub spinowego) przez kropkę. Dla tego przypadku określono:

- konwencjonalną i spinową wydajność termoelektryczną jako funkcję poziomu kropki i parametru polaryzacji spinowej.

W pracy wykazano istotny wpływ zjawiska blokady kulombowskiej na efekty transportu ciepła i ładunku w badanym układzie. Przewidziano także możliwość pojawienia się znaczącego spinowego efektu Seebecka dla badanej konfiguracji elektrod i kropki kwantowej. Wyznaczone wartości współczynnika Lorenza wskazały na znaczne odchylenie stosunku przewodnictwa elektrycznego i

ciepłego rozpatrywanego układu od makroskopowego prawa Wiedemanna-Franza, zwłaszcza w trybie blokady kulombowskiej.

Z powodu dużej aktualności podjętego tematu badawczego praca uzyskała aż **161 cytowań**.

* * *

2. M. Wierzbicki and R. Świrkwicz, „Electric and thermoelectric phenomena in a multilevel quantum dot attached to ferromagnetic electrodes”, *Physical Review* **B 82** (2010) 165334, impact factor = 3,774

Badanym układem fizycznym była dwupoziomowa kropka kwantowa sprzężona z ferromagnetycznymi elektrodami i poddana wpływowi zewnętrznego napięcia bramkowego (ang. *gate voltage*), które może przesuwając oba poziomy energetyczne kropki. Ponieważ gradient temperatury złącza może wywoływać zależną od spinu różnicę potencjałów między elektrodami, dopuszczono także możliwość zaistnienia różnicy potencjałów chemicznych elektrod dla dwóch kanałów spinowych. W hamiltonianie drugiego kwantowania uwzględnione zostały oddziaływania kulombowskie elektronów wewnątrz i między-poziomowe. Obliczenia wykonano w formalizmie nierównowagowych funkcji Greena metodą równań ruchu, za pomocą procedury Changa i Kuo stosowanej przy założeniu blokady kulombowskiej. W efekcie otrzymano nieliniowy układ równań algebraicznych dla jedno i dwucząstkowych liczb obsadzeń, który rozwiązywano numerycznie. Nieliniowy prąd ładunkowy i spinowy otrzymano całkując wyrażenie zawierające przyspieszoną, opóźnioną i mniejszościową funkcję Greena. Założono przy tym możliwość różnego sprzężenia kropki z elektrodami dla dwóch kanałów spinowych, opisane tzw. parametrem spinowym. Główne wyniki pracy są następujące:

- Wyznaczono różnicowy współczynnik przewodnictwa elektrycznego czyli pochodną prądu elektrycznego po napięciu bramkowym jako funkcję napięcia bramkowego i napięcia między elektrodami (ang. *bias voltage*) w postaci schematu tzw. „diamentów kulombowskich”.
- Określono charakterystykę prądowo-napięciową badanego układu dla przypadków symetrycznej i asymetrycznej konfiguracji elektrod. Przypadek symetryczny odpowiada równej wartości parametru spinowego dla prawej i lewej elektrody. Przypadek asymetryczny oznacza, że stopnie sprzężenia z kanałami spinowymi prawej i lewej elektrody są różne.
- Obliczono liczbę obsadzeń i moment magnetyczny zgromadzony w kropce kwantowej w zależności od napięcia międzyelektrodowego.

Zbadano także pracę układu w trybie nieliniowym dla dużej różnicy temperatur między elektrodami. Rozpatrzono dwa przypadki: symetryczna i silnie asymetryczna konfiguracja elektrod. Zostały uzyskane następujące rezultaty:

- Wyznaczono generowane napięcia elektryczne i spinowe oraz odpowiednio konwencjonalny i spinowy współczynnik Seebecka jako funkcje napięcia bramkowego i różnicy temperatur między elektrodami, przy warunku zerowania się odpowiednio prądu elektrycznego i spinowego.
- Określono współczynnik magnetotermoelektryczny jako różnicę wielkości efektu Seebecka dla równoległej i antyrównoległej konfiguracji momentów magnetycznych elektrod.
- Zbadano zależność spinowego efektu Seebecka od różnicy temperatur elektrod, dla różnych wartości indukowanej spinowej różnicy potencjałów chemicznych elektrod.

W pracy wykazano istnienie ujemnego różnicowego przewodnictwa elektrycznego, spowodowanego efektem blokady spinowej, w przypadku gdy jedna z elektrod układu jest niemagnetyczna, a druga jest w stanie ferromagnetyzmu półmetalicznego (przewodzącej elektrony w jednym kanale spinowym). Dla tej konfiguracji elektrod przewidziano także, że w przypadku nieliniowym, dla dużej różnicy temperatur między elektrodami, można uzyskać znaczące wzmocnienie efektów termoelektrycznych.

Praca uzyskała **34 cytowania**

* * *

3. M. Wierzbicki, R. Świrkowicz, „Enhancement of thermoelectric efficiency in a two-level molecule”, *Journal of Physics Condensed Matter* **22** (2010) 185302, impact factor = 2,332

W pracy określono własności termoelektryczne dwupoziomowej molekuly (kropki kwantowej), sprzężonej z zewnętrznymi elektrodami. Przyjęto, że położeniem poziomów kropki kwantowej można sterować za pomocą przyłożonego napięcia bramkowego. W hamiltonianie drugiego kwantowania opisującym badany układ zostały uwzględnione za pomocą modelu Hubbarda oddziaływania kulombowskie dwóch elektronów o przeciwnym spinie obsadzających ten sam poziom kropki kwantowej oraz elektronów na różnych poziomach. Uwzględniono także możliwą różnicę sprzężeń (asymetrię) między prawą i lewą elektrodą i poszczególnymi poziomami kropki kwantowej. Do wyznaczenia nierównowagowych funkcji Greena została zastosowana metoda równania ruchu w wersji Changa i Kuo dla reżimu blokady kulombowskiej. Otrzymany układ równań algebraicznych dla jedno i dwucząstkowych liczb obsadzeń został rozwiązany numerycznie. Współczynniki termoelektryczne obliczono w przybliżeniu liniowym dla małej różnicy temperatur między elektrodami. Wyniki pracy są następujące:

W pierwszej części pracy została rozważona kropka kwantowa dla której różnica energii poziomów jest stała. Dla tego przypadku wyznaczono:

- położenie pików przewodnictwa elektrycznego i cieplnego układu w funkcji napięcia bramkowego dla różnych stopni sprzężenia elektrod z kropką,

- współczynnik Seebecka w funkcji napięcia bramkowego i temperatury złącza,
- maksima współczynnika wydajności termoelektrycznej ZT w funkcji napięcia bramkowego dla różnych stopni sprzężenia elektrod z kropką oraz dla różnych temperatur złącza.

Wykazano, że badany układ wykazuje największą wydajność termoelektryczną dla silnego sprzężenia z elektrodami. Pokazano także możliwość dużych oscylacji współczynnika Seebecka przy zmianie napięcia bramkowego, ze względu na efekt ograniczenia kwantowego i blokady kulombowskiej. Uzasadniono istnienie możliwych do osiągnięcia pików przewodnictwa cieplnego i elektrycznego za pomocą mechanizmu tunelowania elektronów w badanym urządzeniu przez różne kanały transmisji.

W drugiej części pracy został zbadany przypadek kropki kwantowej, dla której każdy z dwóch poziomów jest niezależnie sprzężony pojemnościowo z bramką sterującą. Przypadek ten może także opisywać układ dwóch kropek kwantowych związanych ze sobą procesem tunelowania. Dla tego przypadku określono te same co wymienione powyżej współczynniki termoelektryczne. Wykazano, że dotodkowy stopień swobody jakim jest różnica energii między poziomami kropki kwantowej znacznie zwiększa różnorodność zachowania układu, prowadząc do wąskich linii maksimum współczynników termoelektrycznych, bardzo czułych na zmiany napięcia bramkowego.

Praca uzyskała 14 cytowań.

* * *

4. R. Świrkowicz, M. Wierzbicki, J. Barnaś, „Thermoelectric effects in transport through a quantum dot attached to ferromagnetic electrodes”, *Journal of Physics: Conference Series* **213** (2010) 012021

W pracy zbadano procesy termoelektryczne dla układu złożonego z jednopoziomowej kropki kwantowej sprzężonej z ferromagnetycznymi elektrodami. Oddziaływanie kulombowskie dwóch elektronów obsadzających poziom energetyczny kropki zostało opisane przy użyciu hamiltonianu Hubbarda. Przyjęto założenie, że sprzężenia z elektrodami dla procesu tunelowania elektronu są różne dla dwóch kanałów spinowych. Wzięto pod uwagę przypadek kolinearnego położenia momentów magnetycznych obu elektrod (równoległe lub antyrównoległe). Powyższe założenie oraz pominięcie oddziaływania spin-orbitalnego pozwoliło nie uwzględniać procesów odwracających spin elektronu (ang. *spin-flipping*) i umożliwiło zastosowanie przybliżenia diagonalnej macierzy transmisji. Wyznaczono następujące parametry termoelektryczne badanego układu, w przypadku liniowej odpowiedzi układu dla małej różnicy temperatur między elektrodami:

- współczynnik efektu Seebecka,
- współczynniki przewodnictwa cieplnego i elektrycznego,

- współczynnik wydajności termoelektrycznej,

jako funkcje położenia poziomu kropki kwantowej, które może być sterowane zewnętrznym napięciem bramkowym, w zależności od:

- temperatury złącza,
- polaryzacji spinowej sprzężenia z elektrodami,
- rozszczepienia spinowego poziomu kropki kwantowej,

dla dwóch konfiguracji (równoległej i antyrównoległej) momentów magnetycznych elektrod. Dla przypadku nieliniowego, przy dużej różnicy temperatur elektrod, wyznaczono także napięcie generowane na złączu, przy zachowaniu warunku zerowania się prądu ładunkowego.

Wykazano, że w niskich temperaturach pracy złącza, efekt blokady kulombowskiej zmniejsza wartość prądu ciepła, tym samym umożliwiając osiągnięcie wysokiej wydajności termoelektrycznej. Rozszczepienie spinowe poziomów kropki kwantowej, które może być wywołane eksperymentalnie przez zewnętrzne pole magnetyczne, także ma potencjalnie duży wpływ na wydajność termoelektryczną urządzenia. Wskazano na możliwość zwiększenia wydajności termoelektrycznej złącza, w wąskim przedziale napięć bramkowych, poprzez odpowiedni dobór wartości rozszczepienia spinowego poziomów kropki kwantowej.

Praca uzyskała 2 cytowania. Praca została przedstawiona przez prof. Józefa Barnasia, na konferencji międzynarodowej 10th Conference of Summer School on Theoretical Physics w Myczkowcach (2009).

* * *

5. M. Wierzbicki, R. Świrkwicz, „Heat transport and thermoelectric efficiency of two-level quantum dot attached to ferromagnetic electrodes”, *Physics Letters A* **375** (2011) 609-613
 impact factor = 1,632

Układem zbadanym w pracy jest dwupoziomowa kropka kwantowa sprzężona z ferromagnetycznymi elektrodami. W hamiltonianie drugiego kwantowania rozszerzono model oddziaływania kulombowskiego, dodając oddziaływanie międzypoziomowe. Spinowo zależną funkcję transmisji układu wyznaczono na podstawie nierównowagowych funkcji Greena. Prądy ciepła i ładunku zostały obliczone w liniowym przybliżeniu transportu balistycznego. Główne wyniki pracy są następujące:

- wyznaczono ładunkowy i spinowy współczynnik wydajności termoelektrycznej ZT (ang. *figure of merit*), zależny od ładunkowych i spinowych współczynników: efektu Seebecka oraz przewodnictwa elektrycznego i cieplnego

- znaleziono maksima ładunkowej i spinowej wydajności termoelektrycznej ZT w funkcji napięcia bramkowego przyłożonego do kropki kwantowej, dla zadanych wartości stopnia sprzężenia kropki z elektrodami

W pracy wykazano, że wydajność termoelektryczna badanego układu silnie zależy od stopnia akumulacji spinowej w elektrodach. Bez akumulacji spinowej optymalną wartość wydajności termoelektrycznej ZT można osiągnąć przy zastosowaniu elektrod niemagnetycznych. Kiedy w układzie pojawia się akumulacja spinowa, to dla dużego gradientu temperatury złącze generuje wówczas różne napięcia dla dwóch kanałów spinowych. W tym przypadku wykazano, że największą wydajność termoelektryczną można osiągnąć dla elektrod z silną polaryzacją spinową, to znaczy z różnym sprzężeniem dla dwóch kanałów spinowych. Znaleziono także magnetyczne konfiguracje elektrod i odpowiednie parametry sprzężenia elektrod z kropką kwantową mogące dać najwyższą wydajność termoelektryczną $ZT \approx 10$ dla tego typu układów.

Praca uzyskała 11 cytowań.

* * *

6. M. Wierzbicki, R. Świrkowicz, „Influence of interference effects on thermoelectric properties of double quantum dots”, *Physical Review* **B 84** (2011) 075410 impact factor = 3,691

Fizycznym układem rozpatrywanym w pracy jest podwójna kropka kwantowa asymetrycznie sprzężona z dwiema elektrodami, poddana wpływowi zewnętrznego napięcia bramkowego oraz zewnętrznego pola magnetycznego sterującego pracą układu. Podwójne kropki kwantowe realizują najprostszy dwupoziomowy model mechaniki kwantowej i dlatego zwane są często sztucznymi molekułami. Te same własności co dwupoziomowa kropka kwantowa może mieć też układ dwóch jednopoziomowych kropek, dla których możliwe jest tunelowanie elektronu między nimi. Interferencja kwantowa wynikająca z różnych dróg tunelowania elektronu w podwójnych kropkach kwantowych prowadzi do tak zwanego efektu rezonansowego Fano. W hamiltonianie drugiego kwantowania wzięto pod uwagę procesy tunelowania oraz kulombowskie oddziaływanie elektronów pomiędzy dwiema kropkami. W celu uwzględnienia wpływu zewnętrznego pola magnetycznego na funkcję falową elektronu zastosowano czynnik fazowy dla efektu Aharonova-Bohma. W pracy wykorzystano formalizm nierównowagowych funkcji Greena. Do obliczenia przyspieszonej i opóźnionej funkcji Greena użyto równania Dysona z energią samoodziaływania. Do wyznaczenia mniejszościowej funkcji Greena użyto równania Keldysza, wykorzystując formułę Ng-Lee. Współczynniki termoelektryczne określono w przybliżeniu odpowiedzi liniowej, dla małej różnicy temperatur między elektrodami, przy założeniu że złącze pracuje bez obciążenia.

W pierwszej części pracy rozpatrzono przypadek braku korelacji kulombowskiej, możliwy do osiągnięcia przy separacji przestrzennej dwóch kropek. Zostały wyznaczone następujące własności

badanego układu:

- Określono przewodnictwo cieplne, współczynnik efektu Seebecka i wydajność termoelektryczną jako funkcje napięcia bramkowego, dla różnych wartości asymetrii sprzężenia kropek kwantowych z elektrodami. Dla niskich temperatur pokazano skutki efektów interferencji kwantowej.
- Wyznaczono wyżej wymienione współczynniki termoelektryczne oraz współczynnik Lorentza jako funkcje kwantu strumienia zewnętrznego pola magnetycznego, w trybie niskiej i wysokiej temperatury złącza.
- Znaleziono maksimum wydajności termoelektrycznej jako funkcję stopnia asymetrii sprzężenia z elektrodami i wartości napięcia bramkowego.

W drugiej części pracy zbadano wpływ korelacji kulombowskiej na własności termoelektryczne układu:

- Określono wpływ wartości parametru oddziaływania kulombowskiego U na przewodnictwo cieplne dla niskiej i wysokiej temperatury układu.
- Określono wpływ strumienia zewnętrznego pola magnetycznego na przewodnictwo cieplne układu, zależne od napięcia bramkowego. Wykazano, że istnieje możliwość sterowania przewodnictwem cieplnym za pomocą zewnętrznego pola magnetycznego.
- Wyznaczono wpływ temperatury złącza na współczynnik Seebecka i wydajność termoelektryczną układu, dla przypadku silnego oddziaływania kulombowskiego między kropkami kwantowymi. Zaobserwowano pik wysokiej wydajności termoelektrycznej $ZT \approx 20$ dla wartości napięcia bramkowego, które przesunęło położenie antywiążącego stanu podwójnej kropki kwantowej do poziomu Fermiego elektrod.
- Znaleziono maksimum wydajności termoelektrycznej w funkcji stopnia asymetrii sprzężenia z elektrodami i siły oddziaływania kulombowskiego przy włączonym i wyłączonym zewnętrznym polu magnetycznym.

Uzyskano następujące wnioski co do zachowania się układu:

- Efekty interferencji kwantowej związane z różnymi drogami jakimi może poruszać się elektron przechodząc przez kropki kwantowe znacząco wpływają na współczynniki termoelektryczne. Stopień interferencji można kontrolować zewnętrznym polem magnetycznym.
- W niskich temperaturach pracy układu można zaobserwować rezonans Fano znacznie podnoszący współczynnik wydajności termoelektrycznej do wartości rzędu 20.
- Wskazano także zakres siły oddziaływania kulombowskiego, zależnej od odległości między kropkami kwantowymi, dla której można uzyskać znaczna moc termoelektryczną.

W pracy podano wskazówki jak osiągnąć maksymalną wydajność termoelektryczną ZT dobierając odpowiednio 4 parametry układu:

- siłę sprzężenia z elektrodami,
- współczynnik asymetrii sprzężenia,
- wielkość korelacji kulombowskiej,
- strumień zewnętrznego pola magnetycznego.

Praca uzyskała znaczną liczbę **51 cytowań**.

* * *

7. M. Wierzbicki, R. Świrkowicz, „Power output and efficiency of quantum dot attached to ferromagnetic electrodes with non-collinear magnetic moments”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **324** (2012) 1516-1522 impact factor = 1,826

W pracy opisano nieliniowy transport ładunku i ciepła poprzez pojedynczą kropkę kwantową, w stanie blokady kulombowskiej. Kropka oddziałuje z ferromagnetycznymi elektrodami, o niekolinearnych momentach magnetycznych. Założono, że kierunek magnetyzacji jednej z elektrod nie pokrywa się z kierunkiem globalnej osi kwantyzacji układu. W tym przypadku stopień tunelowania elektronu z kropki do elektrody zależy od jego spinu i kąta magnetyzacji elektrody. Położenie poziomu energetycznego kropki kwantowej może być zmieniane za pomocą zewnętrznego napięcia przyłożonego do kropki poprzez bramkę (dodatkową elektrodę sterującą). Opis teoretyczny układu oparto na formalizmie nierównowagowych funkcji Greena i równaniu Dysona w przybliżeniu Hartree-Focka. Liczby obsadzeń wyznaczono w sposób samouzgodniony stosując równanie Keldysza i formułę Ng-Lee. Przyjęto przybliżenie, stosowane dla niskich temperatur pracy tego typu złącza termoelektrycznego, że fonony nie mają wpływu na przewodnictwo cieplne (nie są aktywowane w niskich temperaturach).

Współczynniki termoelektryczne określono przy założeniu nieliniowej odpowiedzi układu, w przypadku gdy złącze pracuje zamieniając energię cieplną w elektryczną, przy dużej różnicy temperatur i poziomów Fermiego elektrod oraz pod obciążeniem elektrycznym. Głównymi parametrami pracy złącza są wówczas:

- moc P użytecznej energii elektrycznej (lub spinowej),
- sprawność η równa stosunkowi uzyskanej mocy P do strumienia ciepła I_Q (lub spinu I_S) płynącego przez złącze.

Główne wyniki pracy są następujące:

- Znalaziono maksimum mocy P i sprawności η efektu termoelektrycznego generowanego przez układ, w zależności od przyłożonego napięcia bramkowego (ang. *gate voltage*) i przyłożonej różnicy potencjałów między elektrodami (ang. *bias voltage*) w przypadku niskiej temperatury elektrod.
- Zbadano zależności maksymalnej mocy P i sprawności η układu od różnicy temperatur między elektrodami dla różnych wartości parametru polaryzacji spinowej elektrod. Parametr ten określa różnicę współczynników tunelowania elektronów między kropką i elektrodami dla dwóch kanałów spinowych.
- Zbadano wpływ kąta między magnetyzacjami elektrod na wyżej wymienione parametry termoelektryczne.

Oba parametry termoelektryczne: moc P i sprawność η nie są od siebie niezależne. W pracy zbadano także korelację między tymi dwoma parametrami dla różnych wartości polaryzacji spinowych elektrod i trzech różnych konfiguracji momentów magnetycznych elektrod: równoległej, nierównoległej i niemagnetycznej. Ostatnim etapem pracy było obliczenie spinowych współczynników maksymalnej mocy i sprawności kropki w zależności od rodzaju magnetycznej konfiguracji elektrod i stopnia ich polaryzacji spinowej.

W pracy pokazano, że w dla kropki kwantowej z ferromagnetycznymi elektrodami możliwe jest osiągnięcie spinowych efektów termoelektrycznych o porównywalnej mocy i sprawności co efekty konwencjonalne. Wykazano, że stan blokady kulombowskiej, gdy jeden elektron obsadzający poziom kropki kwantowej przeciwdziała tunelowaniu drugiego elektronu przez kropkę, istotnie wpływa na moc i sprawność termoelektryczną. Czytelne graficzne diagramy korelacji konwencjonalnych i spinowych parametrów P i η przedstawione w pracy mogą służyć pomocą przy projektowaniu urządzeń termoelektrycznych opartych na kropkach kwantowych.

Praca uzyskała 8 cytowań.

* * *

8. M. Wierzbicki, R. Świrkowicz, „Electrical and Heat Currents in Nanoscopic System with Ferromagnetic Electrodes of Non-Collinear Magnetic Moments”, *Acta Physica Polonica A* **121** (2012) 1073 impact factor = 0,531

W pracy rozważono układ złożony z pojedynczej kropki kwantowej sprzężonej z dwiema ferromagnetycznymi elektrodami. Rozpatrzono przypadek niekolinearny, w którym kierunek magnetyzacji elektrod nie pokrywa się z osią kwantyzacji kropki kwantowej. Korelacje międzyelektronowe uwzględniono stosując model Hubbarda, opisujący oddziaływanie dwóch elektronów o przeciwnych spinach obsadzających poziom kropki kwantowej. Nierównowagowe

przyspieszone i opóźnione funkcje Greena wyznaczono w przybliżeniu Hartree-Focka z równania Dysona. Współczynniki termoelektryczne zostały obliczone przy założeniu nieliniowego reżimu pracy złącza termoelektrycznego (przy obciążeniu złącza), dla dużej różnicy temperatur między elektrodami i poziomów Fermiego elektrod.

W pracy wyznaczono współczynniki przewodnictwa cieplnego i elektronowego badanej kropki kwantowej

- w funkcji napięcia między elektrodami (ang. *bias voltage*) dla równoległej i antyrównoległej konfiguracji momentów magnetycznych elektrod,
- w funkcji różnicy temperatur złącza dla niekolinearnych konfiguracji momentów magnetycznych elektrod.

Następnie wyznaczono współczynnik magnetorezystancji tunelowej (ang. *tunnel magnetoresistance* TMR) zdefiniowany jako względna różnica prądów płynących przez złącze dla równoległej i antyrównoległej konfiguracji momentów magnetycznych elektrod. Zbadano zależność TMR od napięcia bramkowego i temperatury złącza. Określono także maksymalną sprawność układu w zależności od różnicy temperatury złącza.

Wykazano możliwość otrzymania ujemnego współczynnika magnetorezystancji tunelowej, dla niewielkiej różnicy potencjałów między elektrodami. Uzasadniono także, że największą sprawność równą około 0,7 sprawności cyklu Carnota, urządzenie osiąga dla antyrównoległej konfiguracji momentów magnetycznych elektrod.

Praca została przedstawiona w 2011 roku na Europejskiej Konferencji Fizyki Magnetyzmu (PM'11) w Poznaniu.

* * *

9. M. Wierzbicki, R. Świrkowicz, „Non-Linear Thermal Current through Multilevel Quantum Dot Coupled to Ferromagnetic Electrodes”, *Acta Physica Polonica A* **121** (2012) 1204
impact factor = 0,531

W pracy zbadano procesy zależnego od spinu transportu ciepła i ładunku przez dwupoziomową kropkę kwantową pracującą w reżimie blokady kulombowskiej, w zakresie nieliniowym, dla dużej różnicy temperatur złącza. W hamiltonianie drugiego kwantowania zostały uwzględnione korelacje elektronowe wewnątrz i międzypoziomowe. Założono:

- asymetrię sprzężenia kropki z lewą i prawą elektrodą,

- różnicę współczynnika tunelowania między elektrodami a kropką dla dwóch poziomów energetycznych kropki,
- różnicę współczynnika tunelowania między elektrodami a kropką dla dwóch kanałów spinowych.

Do obliczeń zastosowano formalizm nierównowagowych funkcji Greena oparty na metodzie równań ruchu. Opóźnione i przyspieszone funkcje Greena oraz jedno i dwucząstkowe liczby obsadzeń wyznaczono w sposób samouzgodniony rozwiązując numerycznie nieliniowy układ równań algebraicznych. Wyznaczono następujące parametry układu:

- prąd ciepła i różniczkowe przewodnictwo cieplne (pochodna prądu ciepła po temperaturze) w funkcji różnicy temperatur elektrod, dla różnych stopni sprzężenia kropki z elektrodami oraz różnych wartości napięcia bramkowego sterującego kropką, dla zerowej wartości prądu elektrycznego płynącego przez złącze,
- współczynnik przewodnictwa magnetotermicznego, (ang. *magnetothermal conductance* MTC) będący względną różnicą wartości prądów ciepła dla równoległej i antyrównoległej konfiguracji momentów magnetycznych elektrod.

W pracy wykazano, że procesy transportu ładunku i ciepła w badanym układzie silnie zależą od konfiguracji momentów magnetycznych elektrod. Określono możliwość zaistnienia efektu przewodnictwa magnetotermicznego (MTC) w badanym układzie, analogicznego do zjawiska magnetorezystancji termicznej (TMR).

Praca została przedstawiona w 2011 roku na Europejskiej Konferencji Fizyki Magnetyzmu (PM'11) w Poznaniu.

* * *

10. M. Wierzbicki, R. Świrkwicz, J. Barnaś, „Giant spin thermoelectric efficiency in ferromagnetic graphene nanoribbons with antidots”, *Physical Review* **B 88** (2013) 235434
impact factor = 3,664

Badanym układem fizycznym były *nanowstążki* (nanoribbons) *grafenowe* z defektami strukturalnymi w postaci wewnętrznych otworów (ang. *antidots*) różnych rozmiarów. Wprowadzenie defektów strukturalnych w nanowstążkach ma na celu zredukowanie ich przewodnictwa cieplnego, a co za tym idzie zwiększenie wydajności termoelektrycznej *ZT*. Mimo, że atom węgla nie wykazuje momentu magnetycznego, nanowstążki grafenowe w niskich temperaturach przejawiają własności magnetyczne. Moment magnetyczny pojawia się na ich krawędzi. Jest to efekt geometryczny wynikający z tego, że atomy węgla na krawędzi nanowstążki mają tylko dwóch sąsiadów, w przeciwieństwie do atomów w

nieskończonej płaszczyźnie grafenowej, która magnetyzmu nie wykazuje. W pracy zbadano nanowstążki grafenowe w konfiguracji ferromagnetycznej, dla której momenty magnetyczne na obu krawędziach są równoległe. Praca ta była pierwszą w literaturze przedmiotu, w której opisano spinowe efekty termoelektryczne nanowstążek grafenowych z otworami. Konwencjonalne efekty termoelektryczne w tych strukturach opisane zostały wcześniej przez T. Gunsta, T. Markussena, A. Jauho i M. Brandbyge w *Phys. Rev.* **B 84** (2011) 155449.

Zastosowany opis teoretyczny opierał się na hamiltonianie drugiego kwantowania w przybliżeniu ciasnego wiązania. Zawierał on parametry przeskoku elektronów na orbitalu $p\pi$ węgla, do pierwszych, drugich i trzecich sąsiadów, wyznaczone na podstawie dopasowania struktury pasmowej grafenu do wyników eksperymentalnych. Ten fragment modelu pozwala opisać część struktury pasmowej grafenu, istotną w zastosowaniach nanotechnologicznych. Własności magnetyczne układu opisano przy uwzględnieniu oddziaływania kulombowskiego elektronów w przybliżeniu Hubbarda (odpychanie dwóch elektronów $p\pi$ w tym samym atomie węgla). Średnie wartości liczby obsadzeń w tym modelu zostały uzyskane metodą samouzgodnienia. Przyjęto założenie, że badana wstążka jest nieskończenie długa, dzięki czemu można było zrezygnować z zastosowania metody nierównowagowych funkcji Greena i użyć prostszej w interpretacji fizycznej metody wyznaczenia współczynnika transmisji elektronowej bezpośrednio na podstawie struktury pasmowej nanowstążki. Fononowe przewodnictwo cieplne uzyskano w przybliżeniu transportu balistycznego, stosując model stałych siłowych dla grafenu, w przybliżeniu oddziaływania sprężystego do czwartych sąsiadów, podany przez J.Zimmermann, P. Pavone, i G. Cuniberti w *Phys. Rev.* **B 78**, (2008) 045410. Oto główne wyniki pracy:

- Zbadano wpływ rozmiarów otworów w nanowstążce na fononowe przewodnictwo cieplne. W temperaturze 300 K defekty strukturalne pozwalają zmniejszyć przewodnictwo o połowę.
- Wyznaczono wpływ defektów strukturalnych na konwencjonalną i spinową strukturę pasmową i odpowiednie współczynniki transmisji nanowstążek. Znajomość obu tych własności wymagana jest do określenia efektów termoelektrycznych.

Dla niezmodyfikowanej (ang. *pristine*) nanowstążki i nanowstążek z defektami strukturalnymi w kształcie otworów określono następujące parametry, w funkcji położenia potencjału chemicznego nanowstążki i dla różnych temperatur pracy:

- spinowe przewodnictwo elektryczne,
- polaryzację prądu spinowego,
- elektronowe przewodnictwo cieplne,
- konwencjonalny i spinowy współczynnik efektu Seebecka,
- konwencjonalny i spinowy współczynnik wydajności termoelektrycznej ZT .

Przesunięcie potencjału chemicznego nanowstążki można uzyskać poprzez jej oddziaływanie z

odpowiednim podłożem. Ze względu na ograniczenie fononowego przewodnictwa ciepłego badany układ wykazuje wysokie wartości wydajności ZT rzędu 10. Wyznaczono także zależności wyżej wymienionych parametrów od szerokości nanowstążki.

Wnioski jakie można było wysnuć z przeprowadzonych badań były następujące.

- Obecność otworów w nanowstążce grafenowej pozwala znacząco zredukować zarówno fononowe jak i elektronowe przewodnictwo ciepłe układu.
- W tego typu modyfikowanych nanowstążkach grafenowych można osiągnąć znaczącą moc spinowego efektu termoelektrycznego w temperaturach rzędu 100 K.

Praca uzyskała **34 cytowania**. Praca była wykonana w ramach grantu Narodowego Centrum Nauki.

* * *

11. M. Wierzbicki, J. Barnaś, R. Świrkowicz, „Thermoelectric properties of silicene in the topological- and band-insulator states”, *Physical Review* **B 91** (2015) 165417 impact factor = 3,718

W pracy zbadano własności termoelektryczne nanowstążek silicenu, ze szczególnym uwzględnieniem topologicznych stanów krawędziowych. *Silicene* jest dwuwymiarowym krzemowym odpowiednikiem grafenu, o heksagonalnej strukturze ułożenia atomów. Różni się od niego dużym sprzężeniem spinowo-orbitalnym, które otwiera przerwę energetyczną, czyniąc silicene potencjalnie bardziej atrakcyjnym materiałem dla zastosowań w elektronice niż grafen. Atomy krzemu w silicenie nie układają się dokładnie w jednej płaszczyźnie (ang. *buckled structure*), co zwiększa bogactwo możliwych zjawisk fizycznych w tym materiale. Sprzężenie spin-orbita powoduje pojawienie się spinowych stanów krawędziowych o energii leżącej w przerwie energetycznej, co czyni nanowstążkę silicenową spinowym izolatorem topologicznym. Podobnie jak w grafenie, oddziaływanie kulombowskie w silicenie prowadzi do zjawiska magnetyzmu krawędziowego.

Nanowstążki silicenowe opisano przy pomocy hamiltonianu drugiej kwantyzacji w modelu ciasnego wiązania. Hamiltonian uwzględnia:

- przeskoki (ang. *hopping*) elektronów na orbitalach $p\pi$ do najbliższych sąsiadów, pozwalające opisać minimalną strukturę pasmową silicenu,
- oddziaływanie spinowo-orbitalne, związane z różnymi torami przeskoku elektronu do drugich sąsiadów, w formie zaproponowanej przez Ezawę i Nagaosę,
- wewnętrzne pole wymienne rozróżniając dwie podsiatki silicenu. Można je zrealizować poprzez oddziaływanie silicenu z ferromagnetycznym podłożem. Ma ono własności podobne do wewnętrznego efektywnego pola magnetycznego.

- zewnętrzne pole elektryczne prostopadłe do płaszczyzny nanowstążki, dające różnicę potencjałów dla dwóch podsiatek silicenu,
- kulombowskie oddziaływanie elektronów w modelu Hubbarda, w przybliżeniu pola średniego, powodujące powstanie uporządkowania magnetycznego badanego materiału.

Średnie wartości liczby obsadzeń dla atomów krzemu określono za pomocą metody samouzgodnienia. Spinową transmisję elektronową wyznaczono przy użyciu metody dopasowania funkcji falowych, z uwzględnieniem fal zanikających w obszarze rozpraszającym. Ta metoda jest równoważna metodzie nierównowagowych funkcji Greena dla formuły Caroli. Współczynniki termoelektryczne zostały wyznaczone w liniowym przybliżeniu transportu balistycznego, przy użyciu szybkiej numerycznej metody obliczania niezupełnych całek Fermi-Diraca.

Pierwsza część wyników pracy dotyczy przypadku bez oddziaływania Hubbarda, z pominięciem uporządkowania magnetycznego.

- Wyznaczono strukturę pasmową badanej nanowstążki i wskazano na istnienie topologicznych stanów krawędziowych. Następnie zbadano ewolucję topologicznych stanów krawędziowych pod wpływem pola wymiennego i pola elektrycznego.
- Zademonstrowano topologiczną przemianę fazową od fazy izolatora topologicznego do fazy izolatora pasmowego, dla pewnej wartości pola wymiennego.
- Zbadano zależność spinowej przerwy energetycznej od wartości wewnętrznego pola wymiennego
- Obliczono współczynniki przewodnictwa cieplnego i elektrycznego oraz współczynnik Seebecka badanego układu, w zależności od wartości potencjału chemicznego, dla różnych wartości wewnętrznego pola wymiennego.
- Określono wpływ szerokości nanowstążki na współczynnik efektu Seebecka.
- Wskazano topologiczną przemianę fazową od fazy izolatora topologicznego do fazy izolatora pasmowego, dla pewnej wartości zewnętrznego pola elektrycznego.
- Obliczono współczynniki przewodnictwa cieplnego i elektrycznego oraz współczynnik Seebecka, w zależności od wartości potencjału chemicznego, dla różnych wartości zewnętrznego pola elektrycznego.

Dla niezerowych wartości obu pól sterujących:

- Pokazano proces zamykania i otwierania przerwy energetycznej dla pojedynczego kanału spinowego, czyniące badany materiał przewodnikiem półmetalicznym.
- Znalaziono maksima mocy konwencjonalnego i spinowego efektu Seebecka, oraz maksima konwencjonalnej i spinowej wydajności termoelektrycznej.

W części pracy uwzględniającej oddziaływanie kulombowskie elektronów w przybliżeniu Hubbarda otrzymano następujące rezultaty:

- Obliczono współczynniki przewodnictwa cieplnego i elektronowego oraz współczynnik Seebecka dla różnych wartości parametru U oddziaływania kulombowskiego.
- Pokazano rozszczepienie energetyczne stanów krawędziowych wywołane wewnętrznym polem wymiennym.
- Objasniono topologiczną przemianę fazową indukowaną polem wymiennym pomiędzy ferromagnetycznymi i antyferromagnetycznymi stanami krawędziowymi.
- Obliczono współczynniki konwencjonalnego i spinowego efektu Seebecka w zależności od pola wymiennego, w obecności oddziaływania kulombowskiego.

Jak widać na podstawie powyższych wyników silicen jest materiałem wykazującym duże bogactwo zjawisk fizycznych, w tym różnych topologicznych przemian fazowych, związanych ze stanami krawędziowymi, dla których gęstość elektronowa jest największe na krawędzi nanowstążki. Oddziaływanie spin-orbita indukuje w badanym materiale także spinowe stany krawędziowe, pozwalające uzyskać znaczący spinowy efekt Seebecka. Dostatecznie silne oddziaływanie kulombowskie może prowadzić w tym materiale do krawędziowego uporządkowania magnetycznego, które łatwo kontrolować za pomocą zewnętrznego pola elektrycznego lub pola wymiennego indukowanego kontaktem z podłożem (ang. *proximity effect*). Wyniki pracy mogą być użyteczne przy projektowaniu i doborze optymalnych parametrów urządzeń spintronicznych opartych na silicenie.

Praca uzyskała 13 cytowań. Praca była wykonana w ramach grantu Narodowego Centrum Nauki.

* * *

12. M. Wierzbicki, J. Barnaś, R. Świrkwicz, „Zigzag nanoribbons of two-dimensional silicene-like crystals: magnetic, topological and thermoelectric properties”, *Journal of Physics Condensed Matter* **27** (2015) 485301 impact factor = 2,357

W pracy zbadano magnetyczne, topologiczne i termoelektryczne własności nanowstążek wykonanych z materiałów typu silicenu, to znaczy wykazujących duże sprzężenie spin-orbita i gofrowaną (ang. *buckled*) planarną strukturę z heksagonalnym ułożeniem atomów. Najprostszy opis tego typu układów polega na użyciu modelu stożków Diraca (ang. *Dirac cones*) opisujących strukturę pasmową badanego materiału tylko wokół poziomu Fermiego. Do prawidłowego określenia magnetycznych i termoelektrycznych własności takich układów należy zastosować bardziej skomplikowany modelowy hamiltonian drugiej kwantyzacji zawierający następujące składniki:

- przeskok (ang. *hopping*) elektronów na orbitalach $p\pi$ pomiędzy najbliższymi sąsiadami,
- oddziaływanie spin-orbita wynikające z różnych dróg przeskoku elektronów pomiędzy drugimi sąsiadami, w sformułowaniu Ezawy i Nagaosy,
- kulombowskie oddziaływanie elektronów w modelu Hubbarda, w przybliżeniu pola średniego.

Te dwa oddziaływania: spin-orbita i kulombowskie odpychanie elektronów występujące jednocześnie w badanych strukturach prowadzą do różnorodnych zjawisk fizycznych, w szczególności powodują istnienie krawędziowych stanów topologicznych, dla których gęstość elektronowa jest największa na krawędzi badanej struktury. W omawianej pracy nie ustalano dokładnej wartości liczbowej siły oddziaływań, ale zbadano własności magnetyczne, topologiczne i termoelektryczne w szerokim zakresie parametrów. Dzięki temu wyniki pracy mają bardziej ogólne znaczenie i można je stosować także dla innych materiałów o planarnej gofrowanej strukturze heksagonalnej mogących pojawić się w przyszłości.

Przyjęto założenie, że oś kwantyzacji równoległa do kierunku lokalnych momentów magnetycznych atomów może być nachylona pod zadaniem kątem do płaszczyzny materiału. Dzięki temu można było otrzymać za pomocą metody samouzgodnienia cztery hipotetyczne stabilne konfiguracje magnetyczne nanowstążek: ferro i antyferromagnetyczne, z momentami magnetycznymi leżącymi w płaszczyźnie nanowstążki i prostopadłymi do niej. Te hipotetyczne konfiguracje mogą być uzyskane w eksperymencie poprzez umieszczenie badanej struktury na podłożu o odpowiednich własnościach magnetycznych.

Współczynniki termoelektryczne zostały obliczone w przybliżeniu odpowiedzi liniowej, za pomocą metody dopasowania funkcji falowych w obszarze rozpraszającym, do fali Blocha w nieskończonych elektrodach. Ta metoda jest równoważna formule Caroli dla nierównowagowych funkcji Greena.

W pierwszej części pracy zbadano zależność energii stabilnych stanów magnetycznych od wartości sprzężenia spin-orbita λ_{SO} i współczynnika U dla oddziaływania Hubbarda. Stanem o najniższej energii dla swobodnej nanowstążki okazał się stan antyferromagnetyczny z momentami magnetycznymi na krawędziach nanowstążki równoległymi do jej płaszczyzny. Następnie wyznaczono strukturę pasmową dla czterech hipotetycznych stabilnych konfiguracji magnetycznych, wykazując istnienie stanów krawędziowych odpowiedzialnych za uporządkowanie magnetyczne.

W drugiej części pracy zbadano zależność współczynników termoelektrycznych od położenia potencjału chemicznego nanowstążki dla dwóch antyferromagnetycznych konfiguracji. Obie konfiguracje różnią się znacznie własnościami termoelektrycznymi, w szczególności wartością współczynnika Seebecka. Wykazano, że konfiguracja antyferromagnetyczna z krawędziowymi momentami magnetycznymi leżącymi w płaszczyźnie nanowstążki wykazuje dziesięciokrotnie większą konwencjonalną wydajność termoelektryczną od konfiguracji prostopadłej.

W trzeciej części pracy zbadano hipotetyczne konfiguracje ferromagnetyczne, możliwe do otrzymania przy kontakcie nanowstążki z podłożem z odpowiedniego materiału ferromagnetycznego. Wykazano możliwość topologicznej przemiany fazowej dla jednej z konfiguracji ferromagnetycznych, od fazy topologicznego izolatora do fazy izolatora pasmowego, przy zmianie wartości sprzężenia spin-orbita. Różnicę w charakterze topologicznym obu faz pokazano także przy pomocy analizy ich współczynników przewodnictwa elektrycznego i cieplnego oraz spinowego i konwencjonalnego współczynnika Seebecka. Okazało się, że konfiguracja wykazująca topologiczną przemianę fazową posiada około dziesięciokrotnie większą spinową i konwencjonalną wydajność termoelektryczną.

Praca uzyskała 9 cytowań. Pracę wykonano w ramach grantu Narodowego Centrum Nauki.

* * *

13. M. Wierzbicki, „Thermoelectric properties of magnetic configurations of graphene-like nanoribbons in the presence of Rashba and spin-orbit interactions”, *Physica E* **87** (2017) 220-227
impact factor = 2,399

W pracy zbadalem własności termoelektryczne nanowstążek opartych na dwuwymiarowych materiałach posiadających strukturę heksagonalną, analogiczną do grafenu. Z tego typu materiałów można wymienić *silicen* - krzemowy analog grafenu i *germanen* - złożony z atomów germanu. W najnowszych doniesieniach naukowych wspomina się także nowy materiał dwuwymiarowy: *stanen* - posiadający strukturę heksagonalną, złożoną z atomów cyny. Tego typu materiały mogą być potencjalnie łatwiej zintegrowane z istniejącą technologią półprzewodnikową niż grafen. Obecne w nich silne oddziaływania elektronowe: spin-orbitalne i oddziaływanie Rashby (ros. Рашба), prowadzą do nowych zjawisk fizycznych nie występujących w grafenie. Oddziaływanie Rashby zawierające sprzężenie dwóch stanów spinowych (spin „w górę” i spin „w dół” wzdłuż osi z będącej osią kwantyzacji układu) powoduje, że średnia wartość spinu elektronu w badanej strukturze może wykazywać także składowe prostopadłe do osi kwantyzacji. Prąd spinowy płynący przez taką strukturę może więc mieć trzy różne składowe: I_x , I_y i I_z .

Badane nanowstążki zostały opisane w pracy przy pomocy modelowego hamiltonianu drugiej kwantyzacji zawierającego następują składniki odpowiadające różnym procesom oddziaływań:

- przeskoczenie elektronów na orbitalach typu $p\pi$ do najbliższych sąsiadów opisujący minimalną strukturę pasmową materiału,
- oddziaływanie spin-orbitalne w modelu Kane-Mele, w wersji Ezawy i Nagaosy
- zewnątrzne oddziaływanie Rashby mogące się pojawić przy kontakcie struktury z odpowiednio dobranym podłożem lub pod wpływem zewnętrznego pola magnetycznego,

- wewnętrzne oddziaływanie Rashby odróżniające dwie podsiatki materiału, w przypadku deformacji struktury silicenu i germanenu, w stosunku do idealnej struktury planarnej grafenu,
- oddziaływanie kulombowskie w modelu Hubbarda, w przybliżeniu pola średniego, prowadzące do powstania krawędziowych stanów magnetycznych, ze zmienną osią kwantyzacji odpowiadającą uporządkowaniu magnetycznemu w płaszczyźnie nanowstążki i prostopadle do niej.

Współczynniki termoelektryczne zostały wyznaczone w przybliżeniu liniowym na podstawie rozwinięcia w szereg wzoru całkowego na prąd elektryczny i spinowy względem energii, wokół wartości poziomu Fermiego elektrod. W pierwszej części pracy dokonałem analizy własności układów wykazujących jedynie zewnętrzne oddziaływanie Rashby. Ten przypadek odpowiada materiałom typu grafenu, w którym nie występuje istotne oddziaływanie spin-orbitalne i nie ma wewnętrznego oddziaływania Rashby.

- Wyzaczyłem energie konfiguracji magnetycznych w zależności od siły zewnętrznego oddziaływania Rashby dla czterech stabilnych konfiguracji ferro- i antyferromagnetycznych z momentami magnetycznymi leżącymi w płaszczyźnie nanowstążki lub prostopadle do niej.
- Określiłem struktury pasmowe dla tych konfiguracji magnetyzmu nanowstążek i wykazałem istnienie topologicznych stanów krawędziowych leżących w przerwie energetycznej odpowiedniego materiału dwuwymiarowego.
- Wyzaczyłem wpływ oddziaływania Rashby na stopień rozszczepienia spinowego struktur pasmowych. Stopień rozszczepienia okazał się niezależny od początkowej konfiguracji magnetycznej.
- Określiłem charakter konwencjonalnego i spinowego przewodnictwa elektrycznego oraz przewodnictwa cieplnego. Przewodnictwa te w zależności od napięcia bramkowego wykazują charakterystyczne „schodki”, wynikające z aktywacji kolejnych kanałów tunelowania elektronów.
- Wyzaczyłem współczynniki Seebecka dla różnych konfiguracji magnetycznych.
- Podałem zależności prądów spinowych od potencjału chemicznego, dla kierunku spinu w płaszczyźnie nanowstążki i prostopadle do niej.

W drugiej części pracy zbadalem wpływ wewnętrznego oddziaływania Rashby i oddziaływania spin-orbita na własności nanowstążki. Ten przypadek odpowiada układom opartym na *silicenie* lub *germanenie*. Dla silnego oddziaływania spin-orbitalnego magnetyczną konfiguracją o najniższej energii jest konfiguracja antyferromagnetyczna, z momentami magnetycznymi zgromadzonymi na krawędzi nanowstążki, leżącymi w jej płaszczyźnie. Dla tej konfiguracji wyznaczyłem:

- wpływ oddziaływań na spinowe rozszczepienie struktury pasmowej,

- zależność prądu spinowego, dla kierunku spinu w płaszczyźnie nanowstążki, od wartości potencjału chemicznego.

Wnioski jakie można wysnuć z otrzymanych wyników są następujące:

- Silne zewnętrzne oddziaływanie Raszby stabilizuje ferromagnetyczną konfigurację materiału w kierunku prostopadłym do płaszczyzny nanowstążki i prowadzi do polaryzacji spinowej przewodnictwa elektrycznego.
- Wprowadzenie oddziaływania Raszby nie daje możliwości istotnego zwiększenia siły konwencjonalnych i spinowych efektów termoelektrycznych, za wyjątkiem konwencjonalnego efektu Seebecka.
- Oddziaływanie Raszby indukuje niezerowy prąd spinowy, dla kierunku spinu w płaszczyźnie materiału, dla wszystkich czterech konfiguracji magnetycznych.

Praca uzyskała 4 cytowania.

* * *

Podsumowanie osiągnięć naukowych będących podstawą wniosku habilitacyjnego

Za najważniejsze osiągnięcia naukowe zawarte w opisanym powyżej cyklu 13 prac, będących podstawą do wniosku habilitacyjnego, uważam:

1. Wykazanie, że spinowe efekty termoelektryczne o wysokiej wydajności można otrzymać w niskowymiarowych układach kwantowych typu kropek kwantowych przy zastosowaniu sprzężenia z ferromagnetycznymi elektrodami. W mojej ocenie wynik ten znalazł uznanie międzynarodowego środowiska naukowego, o czym świadczy duża liczba 161 cytowań artykułu nr 1.
2. Wykazanie decydującego wpływu efektów interferencyjnych na warunki pracy podwójnej kropki kwantowej i uzasadnienie, że tego typu efekty mogą znacząco podnieść wydajność i sprawność termoelektryczną kwantowych układów niskowymiarowych. O znaczeniu tego osiągnięcia świadczy duża liczba 51 cytowań artykułu nr 6.
3. Wykazanie, że w przypadku nieliniowej pracy złącza termoelektrycznego, przy dużym gradiencie temperatur, wzmocnienie spinowych efektów termoelektrycznych można uzyskać przez zastosowanie elektrod posiadających strukturę pasmową półmetal, to znaczy przewodzących tylko jeden kanał spinowy. O znaczeniu tego osiągnięcia świadczy znaczna liczba 34 cytowań artykułu nr 2.
4. Uzasadnienie celowości zastosowania nanowstążek grafenowych z defektami strukturalnymi w postaci otworów w celu uzyskania spinowych efektów termoelektrycznych o wysokiej

wydajności. O znaczeniu tego osiągnięcia świadczy znaczna liczba 34 cytowań artykułu nr 10.

Wydaje mi się, że w moich pracach badawczych wykazałem się umiejętnością skutecznego wykorzystania zarówno fizyki klasycznej, jak i kwantowej do opisu zjawisk istotnych dla rozwoju nowych technologii materiałowych i budowy nowych przyrządów elektroniki spinowej. Cykl publikacji, uznany przeze mnie za istotne osiągnięcie naukowe, zawiera wyniki które zostały otrzymane w sposób zapewniający oryginalność badań i publikowalność w najlepszych czasopismach specjalistycznych. Prace te zawierają także szczegółową analizę przyczyn fizycznych opisywanych zjawisk. Wybór problematyki nie był podyktowany w żadnym stopniu poszukiwaniem modnej obecnie optymalnej cytowalności, tym nie mniej niezłe wskaźniki bibliometryczne dowodzą, w moim odczuciu, wartości poznawczej przeprowadzonych badań.

* * *

Pozostałe prace dotyczące niskowymiarowych układów kwantowych

Poniżej podaję także dotychczasowe prace dotyczące tematu efektów termoelektrycznych w niskowymiarowych układach kwantowych. Oparte były one na obliczeniach ab-initio metodą teorii funkcjonału gęstości. Oceniam, że mój udział w tych pracach nie był na tyle znaczący, aby traktować je jako podstawę wniosku o habilitację. Myślę, że w przyszłości mogą posłużyć memu młodszemu koledze Krzysztofowi Zbereckiemu do zdobycia następnego stopnia naukowego.

- K. Zberecki, M. Wierzbicki, J. Barnaś, „Thermoelectric effects in silicene nanoribbons”, *Physical Review B* 88 (2013) 115404, **66 cytowań**, $IF=3,664$

Moim wkładem do tej publikacji było stworzenie modelu sprężystego oddziaływania atomów krzemu w płaszczyźnie silicenowej, w przybliżeniu do czwartych sąsiadów. Współczynniki modelu otrzymano poprzez dopasowanie metodą najmniejszych kwadratów fononowej struktury pasmowej do obliczeń ab-initio. W własnoręcznie napisanym zestawie programów zastosowałem metodę optymalizacji funkcji celu opartą na algorytmie PRAXIS autorstwa Richarda Brenta. Na podstawie tego modelu wyznaczyłem wkład fononów do przewodnictwa cieplnego nanowstążek silicenowych.

Model ten okazał się na tyle interesujący, że skontaktowała się ze mną grupa badawcza z Wydziału Fizyki Ciała Stałego Uniwersytetu w Kashan, w Iranie, z którą podzieliłem się kodem źródłowym pozwalającym na dopasowywanie stałych siłowych dla materiałów niskowymiarowych na podstawie fononowej struktury pasmowej obliczonej metodami ab-initio.

- K. Zberecki, R. Świrko, M. Wierzbicki, J. Barnaś, „Enhanced thermoelectric efficiency in

ferromagnetic silicene nanoribbons terminated with hydrogen atoms”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **16** (2014) 12900-12908, **21 cytowań**, $IF=4,493$

Dla tej publikacji wykonałem obliczenia współczynników termodynamicznych nanowstążek silicenowych w przybliżeniu liniowym na podstawie obliczeń ab-initio współczynnika transmisji elektronowej. Zastosowałem do tego celu własnoręcznie napisane programy, korzystające z szybkiego algorytmu numerycznego obliczania niezupełnych całek typu Fermiego-Diraca (ACM Digital Library, Algorithm 745) autorstwa Michele Goano.

- K. Zberecki, M. Wierzbicki, R. Świrkwicz, J. Barnaś, „Spin effects in thermoelectric phenomena in SiC nanoribbons”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **17** (2015) 1925-1933, **7 cytowań**, $IF=4,449$

W tej pracy wyznaczyłem pasmową strukturę fononową nanowstążek z węgla krzemu, stosując półempiryczną metodę PM6 chemii kwantowej w programie OpenMOPAC. Na tej podstawie obliczyłem za pomocą własnych programów współczynnik transmisji fononowej, a następnie wkład fononów do przewodnictwa cieplnego. Porównałem wyniki dla różnych szerokości nanowstążek, z otrzymanymi na podstawie znanych stałych sprężystości w modelu oddziaływania do 4-sąsiadów.

- K. Zberecki, R. Świrkwicz, M. Wierzbicki, J. Barnaś, „Spectacular enhancement of thermoelectric phenomena in chemically synthesized graphene nanoribbons with substitution atoms”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **18** (2016) 18246-18254, **9 cytowań**, $IF=4,123$

W tej pracy wykonałem podobne obliczenia jak w poprzedniej, tym razem dla nanowstążek grafenowych z podstawionymi atomami glinu lub azotu.

- K. Zberecki, M. Wierzbicki, R. Świrkwicz, „Unique magnetic and thermoelectric properties of chemically functionalized narrow carbon polymers”, *Journal of Physics Condensed Matter* **29** (2017) 045303, **2 cytowania**, $IF=2,617$

W tej pracy wykonałem podobne obliczenia jak w poprzedniej, tym razem dla nanowstążek opartych na polimerach węglowych funkcjonalizowanych grupą metylową lub nitrową.

* * *

Byłem także promotorem 2 prac magisterskich związanych z tematem nanostruktur niskowymiarowych na Wydziale Fizyki PW. Jedna z nich dotyczyła struktury pasmowej dwuwymiarowego silicenu, obliczonej metodą ab-initio DFT, a druga porównała metody wyznaczania niezmiennika topologicznego Z_2 dla układów opisanych modelowymi hamiltonianami drugiego kwantowania. Jak się

okazało tylko jedna z metod podawanych w literaturze działa w praktyce dla materiałów typu silicenu.

* * *

Informacje o pozostałym dorobku naukowych

Dla pełnej informacji o moim dorobku naukowym podaję także zagadnienia jakie poruszałem w pozostałych pracach wykonanych przeze mnie przed i po doktoracie w ośmiu różnych gałęziach fizyki i nie będących podstawą do wniosku habilitacyjnego. Prace w poszczególnych dziedzinach przedstawiono w porządku chronologicznym.

1. praca z dziedziny chaosu deterministycznego:

- M. Wierzbicki, J. Żebrowski, „Local multifractal properties of a spatially extended chaotic system through time delay coordinate reconstruction”, *Acta Physica Polonica B* **27** (1996) 2045

Praca prezentuje główne wyniki mojej pracy magisterskiej dotyczące nowego na owe czasy pojęcia *multifraktali*, które charakteryzują się nieskończoną liczbą wymiarów fraktalnych. Wyniki opublikowane w powyższej pracy wzbudziły zainteresowanie jednego z Uniwersytetów na Bliskim Wschodzie. Okazało się bowiem, że pojęcie multifraktali stosuje się między innymi do opisu rozkładu przestrzennego złóż ropy naftowej.

2. prace z magnetoptyki:

- M. Wierzbicki, J. Kociński, „Light propagation in the helical antiferromagnetic phase of x-MnSe/ZnTe superlattice”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **156** (1996) 2184
- M. Wierzbicki, J. Kociński, „Spatially modulated optical tensors in magnetic superlattices”, *Surface Science* **402-404** (1998) 382-385, *IF=2,241*

Publikacje te zawierają główne wyniki mojej pracy doktorskiej dotyczące procesów propagacji światła w supersiatkach magnetycznych. Jako doktorant na Wydziale Fizyki PW byłem stypendystą Fundacji na rzecz Nauki Polskiej. W okresie doktoratu prezentowałem wyniki swoich badań co roku na międzynarodowych konferencjach zagranicznych: w Cambridge w Wielkiej Brytanii, Genui we Włoszech, Enschede w Holandii i Kopenhadze. W trakcie ostatniej konferencji w Istambule w 1999 byłem świadkiem tragicznego w skutkach trzęsienia ziemi. Muszą przyznać, że przeżycia podczas tego zdarzenia (rodzina przez pewien czas uważała mnie za zmarłego) zniechęciły mnie nieco do dalekich podróży zagranicznych.

3. prace na temat fizyki ciała stałego:

- L. Adamowicz, M. Wierzbicki, „Symmetry Induced Half-Metallic Alkaline Earth Ferromagnets”, *Acta Physica Polonica A* **115** (2009) 217-219, 4 cytowania, $IF=0,433$
- K. Zberecki, L. Adamowicz, M. Wierzbicki, „Ab initio prediction of half-metallic ferromagnetic metamaterials composed of alkali metals with nitrogen”, *Physica Status Solidi B* **246** (2009) 2270-2278, 7 cytowań, $IF=1,150$

W pracach tych przewidziano istnienie nowych półmetalicznych materiałów ferromagnetycznych opartych na metalach alkalicznych. Własności tych materiałów zostały wyznaczone za pomocą obliczeń ab-initio, w formalizmie teorii funkcjonału gęstości, metodą linearyzowanych fal płaskich uzupełnianych przez funkcje sferyczne. Określono nowe stabilne struktury krystalograficzne oraz ich uporządkowanie magnetyczne na podstawie spinowej struktury pasmowej i gęstości stanów. Prace te wykonałem jako członek Zakładu Badań Strukturalnych Wydziału Fizyki PW.

4. prace z optyki nieliniowej:

- J. Petykiewicz, M. Wierzbicki, „Polarization variations of a high intensity light transmitted through the nematic liquid crystal”, *Journal of Technical Physics* **37** (1996) 243
- B. Pura, J. Petykiewicz, L. Adamowicz, W. Jęda, M. Wierzbicki, K. Brudzewski, „Polarisation control of light by light in a nonlinear polymer”, *Applied Physics B* **67** (1998) 211-215, $IF=1,566$
- M. Wierzbicki, J. Kociński, „Light-wave polarization bistability in a gyrotropic magnetic medium”, *Applied Surface Science* **142** (1999) 272-275, $IF=1,195$
- B. Pura, M. Wierzbicki, J. Petykiewicz, G. Ratusznik, Z. Wrzesiński, „Polarization bistability in a smectic-A liquid crystal”, *Optica Applicata* **31** (2001) 619-624, $IF=0,298$
- M. Wierzbicki, „A control algorithm applied to polarization states of light in the nonlinear optical resonator”, *Control and Cybernetics* **31** (2002) 129-139, $IF=0,326$
- B. Pura, J. Petykiewicz, M. Wierzbicki, R. Ciołek, Z. Wrzesiński, „Interaction of two light beams with different polarizations in TGS”, *Applied Physics B* **75** (2002) 549-551, $IF=2,080$

- K. Osuch, B. Pura, J. Petykiewicz, M. Wierzbicki, Z. Wrzesiński, „The optical bistability of polarisation in B_3NH_4 crystal caused by the optical Kerr effect”, *Optical Materials* **27** (2004) 39-43, 2 cytowania, $IF=1,381$
- K. Osuch, B. Pura, J. Petykiewicz, M. Wierzbicki, Z. Wrzesiński, „Polarisation dependent nonlinear interaction of two light beams in $LiIO_3$ crystal”, *Optical Materials* **27** (2004) 45-49, 2 cytowania, $IF=1,339$
- G. Ratusznik, R. Ciołek, B. Pura, M. Wierzbicki, R. Świłło, I. Zadrozna, K. Osuch, „An all-optical polymeric light modulator based on a Mach-Zehnder interferometer”, *Optics Communications* **259** (2006) 261-264, $IF=1,480$
- I. Zadrozna, M. Wierzbicki, E. Kaczorowska, „Synthesis and characterization of novel polyarylates bearing NLO moieties ”, *Journal of Applied Polymer Science* **101** (2006) 2195-2201, $IF=1,306$
- R. Ciołek, K. Osuch, B. Pura, M. Wierzbicki, A. Zagórski, Z. Wrzesiński, „Optical bistability in $BaTiO_3$ ”, *Optical Materials* **28** (2006) 1341-1343, 7 cytowań, $IF=1,709$

Jak widać z powyższego spisu moja działalność w dziedzinie optyki nieliniowej dotyczyła dwóch tematów:

- polaryzacyjna bistabilność optyczna
- polimery do zastosowań w optyce nieliniowej.

W ramach tych badań odbyłem w 2003 roku miesięczną roboczą wizytę na Wydziale Fizyki University of South Africa (UNISA) w Pretorii, w Republice Południowej Afryki, zorganizowaną przez tragicznie zmarłego profesora tamtejszego uniwersytetu Krzysztofa Osucha, sfinansowaną w ramach umowy między Rządem RP i Republiką Południowej Afryki o wspieraniu współpracy naukowej pomiędzy oboma państwami.

Mój wkład jeśli chodzi o prace dotyczące procesów bistabilności optycznej polegał na udziale w teoretycznym opisie zjawisk bistabilności, w celu uzyskania zadowalającego wyjaśnienia wyników pomiarów eksperymentalnych. Stosowałem teoretyczne metody optyki nieliniowej, które sprowadzają się w ogólnym zarysie do redukcji równań Maxwella dla ośrodka nieliniowego, za pomocą przybliżenia wolno-zmiennej amplitudy, do układów nieliniowych równań różniczkowych. Równania te czasami dają się rozwiązać analitycznie przy użyciu funkcji eliptycznych, jeśli znajdzie się odpowiednie stałe ruchu czyli wielkości zachowane w trakcie procesu propagacji światła, wynikające z

tak zwanych relacji symetrii Kleinmana. Do rozwiązywania tych równań używałem systemu algebry symbolicznej *Mathematica*, a w przypadku potrzeby rozwiązań numerycznych писаłem własne programy.

W pracy w *Control and Cybernetics* opisałem algorytm mojego autorstwa do sterowania stanem polaryzacji światła w nieliniowej wnęce Fabry-Pérot, oparty na metodzie odwrotnej optymalizacji (ang. *inverse optimization*). W ówczesnym czasie wydawało się, że polaryzacyjna bistabilność optyczna będzie mogła znaleźć szerokie zastosowanie w optoelektronice. W praktyce okazało się, że trudno otrzymać kontrolowane efekty o zadowalającej charakterystyce, dla procesu przełączania światła za pomocą światła, mogące prowadzić do realizacji zintegrowanych układów optycznych. Wiedza z teorii chaosu deterministycznego, którą uzyskałem w trakcie pisania pracy magisterskiej doprowadziła mnie do wniosku, że w układzie nieliniowym jakim jest wnęka rezonansowa Fabry-Pérot wypełniona materiałem o nieliniowych własnościach optycznych, część efektów przewidywanych teoretycznie i związanych z bistabilnością polaryzacji światła może nie dać zrealizować się eksperymentalnie z powodu chaotycznego zachowania się układu.

Prace w dziedzinie polimerów do zastosowań w optyce nieliniowej doprowadziły do udanej syntezy nowych polimerów na Wydziale Chemii Politechniki Warszawskiej i charakteryzacji ich nieliniowych własności optycznych. Prace na temat polimerów w optyce nieliniowej wykonywałem w ramach grantu Narodowego Centrum Nauki pt. „Otrzymywanie polimerów nieliniowo-optycznych; projektowanie i synteza monomerów polikondensacja powierzchniowa w reaktorze helikoidalnym”, kierowanego przez prof. dr hab. Irminę Zadrożną z Wydziału Chemii PW. Zespół z Zakładu Optyki Nieliniowej Wydziału Fizyki PW, którego byłem członkiem, pracował nad wdrożeniem otrzymanych polimerów do zastosowań w optoelektronice.

Moim wkładem pracy było badanie możliwych konformacji (struktury przestrzennej) rozważanych polimerów, a następnie obliczenia nieliniowych podatności polimerów za pomocą gotowych programów z chemii kwantowej. W bardziej złożonych przypadkach, kiedy obliczenia dla całego monomeru byłyby zbyt długotrwałe, wykonywałem obliczenia nieliniowej polaryzowalności jedynie dla fragmentu polimeru zwanego chromoforem, który odpowiadał za nieliniowe własności optyczne. Następnie stosowałem przybliżoną metodę pola średniego dla obliczania makroskopowej optycznej podatności nieliniowej, analogiczną do klasycznej teorii Clausiusa-Mossottiego dla przypadku nieliniowego, zaproponowaną przez W.S. Verwoerda w *J. Quant. Chem.* **103** (2005) 215 i zmodyfikowaną przeze mnie w celu przeprowadzenia efektywnych obliczeń numerycznych. Obliczenia komputerowe były dokonywane w ramach kierowanego przeze mnie grantu obliczeniowego Centrum Komputerów Dużej Mocy Interdyscyplinarnego Centrum Modelowania w Warszawie nr G29-13 „Obliczenia podatności nieliniowej polimerów”. Wyniki prac nad własnościami nieliniowymi polimerów były przedstawione przeze mnie i moich współautorów na 11th International Conference on Polymers and Organic Chemistry, w Pradze (2004).

Byłem także promotorem 3 prac magisterskich na Wydziale Fizyki PW dotyczących nieliniowych własności optycznych polimerów.

5. prace z dziedziny ultraszybkich detektorów optycznych

- M. Białous, K. Świtkowski, A. Kozanecka-Szmigiel, M. Wierzbicki, B. Pura, „Investigations of photoresponse signals of LT-GaAs photodetector”, *Optical Applicata* **39** (2009) 161-167, $IF=0,358$
- M. Białous, B. Pura, J. Strzeszewski, M. Wierzbicki, K. Brudzewski, „N⁺GaAs subpicosecond photodetector irradiated by fast neutrons”, *Applied Physics* **B 96** (2009) 471-477, $IF=1,992$

Dla tych dwóch prac wykonałem obliczenia metodą TDFD (ang. *time-dependent finite difference method*) oddziaływania detektora ze światłem padającej wiązki laserowej optymalizując konfigurację elektrod fotodetektorów pod kątem uzyskania jak najszybszego czasu reakcji. Zastosowałem gotowy pakiet programów TDFD dla równań Maxwella pod nazwą „LC”, będący produktem firmy Cray. Później podobne obliczenia wykonał mój magistrant na Wydziale Fizyki PW.

6. praca z dziedziny optyki dyfrakcyjnej

Jako osiągnięcie w dziedzinie optyki dyfrakcyjnej mogę wymienić mój udział w zgłoszeniu patentowym dotyczącym nowego sposobu pomiaru średnicy wałków na podstawie rejestracji ich obrazu dyfrakcyjnego:

- J. Mąkowski, J. Orzechowski, M. Wierzbicki, R. Jabłoński, „Method and device for measurement of linear dimension of an object”, EP2667148A2 (2013).

Zgłoszenie patentowe sfinansowała Polska Spółka Inżynierska DigiLab sp. z o.o. Jest to jedyne znane mi zastosowanie praktyczne teorii dyfrakcji Younga-Rubinowicza, które zaproponował uczeń prof. Wojciecha Rubinowicza prof. Jan Petykiewicz, z którym miałem przyjemność współpracować w Zakładzie Optyki Nieliniowej Wydziału Fizyki PW. Na podstawie wzorów analitycznej teorii dyfrakcji Younga-Rubinowicza, w przybliżeniu fazy stacjonarnej, z uwzględnieniem fali padającej i krawędziowej, przygotowałem zestaw programów numerycznych do analizy położenia maksimumów dyfrakcyjnych w zależności od rozmiaru cylindra, konfiguracji przestrzennej układu i parametrów wiązki laserowej. Według współautora patentu dr inż. Jerzego Mąkowskiego nowa metodologia pomiaru daje wyniki dokładniejsze od najlepszych dostępnych na rynku urządzeń produkcji japońskiej opartych jedynie na pomiarze cienia geometrycznego.

7. prace z dziedziny fizyki wysokich ciśnień:

- D. Tefelski, C. Jastrzębski, M. Wierzbicki, R. Siegoczyński, A. Rostocki, K. Wieja, R. Kościeszka, „Raman spectroscopy of triolein under high pressures”, *High Pressure Research* **30** (2010) 124-129, 8 cytowań, $IF=0,995$
- M. Wierzbicki, R. Kościeszka, D. Tefelski, R. Siegoczyński, „Determination of thermodynamic parameters of oleic acid under high pressure”, *High Pressure Research* **30** (2010) 135-141, 8 cytowań, $IF=0,995$

W tych dwóch pracach wykorzystałem swoją wiedzę z termodynamiki i fizyki statystycznej do opracowania metodologii wyznaczenia współczynników termodynamicznych cieczy oleistych na podstawie ich pomiarów w komorze wysokich ciśnień. W wyniku tych badań powstał napisany przeze mnie zestaw programów numerycznych wyznaczających powierzchnie fazowe w przestrzeni termodynamicznej (p, V, T), z wykorzystaniem biblioteki numerycznej SURFIT autorstwa Paula Dierckxa. Wykonałem także szczegółowe symulacje numeryczne procesu dyfuzji ciepła i rozkładu temperatury w komorze, bazując na jej projekcie technicznym, za pomocą własnoręcznie napisanych programów rozwiązujących równania dyfuzji. Obliczenia te były niezbędne do prawidłowej kalibracji procesu pomiaru temperatury. Dodatkowo, w pierwszej pracy wykonałem także obliczenia parametrów termodynamicznych badanego materiału, metodą dynamiki molekularnej, za pomocą gotowego pakietu programów, w celu porównania wyników z eksperymentem. Pracę wykonałem we współpracy z Zakładem Wysokich Ciśnień Wydziału Fizyki Politechniki Warszawskiej. Prace te były przedstawiane przez moich współautorów na konferencji 47th European High Pressure Research Group Meeting (2009) w Paryżu.

8. prace z metod matematycznych fizyki:

- J. Kociński i M. Wierzbicki, „The Schwarzschild solution in a Kaluza-Klein theory with two times”, artykuł w książce: V. Dvoeglazov, A. Espinoza Garrido (Eds.) „Relativity, Gravitation, Cosmology”, Nova Science Publishers, New York (2004)
wersja artykułu z serwisu Arxiv.org uzyskała 8 cytowań
- J. Kociński i M. Wierzbicki, „The Matrix Algebras of Continuous Groups with Antilinear Operations”, *International Journal of Theoretical Physics* **49** (2010) 1524-1548 $IF=0,670$

Prace te wykonałem we współpracy z promotorem mojej pracy doktorskiej, który obecnie znajduje się na zasłużonej emeryturze. Pierwsza praca prezentuje nowe rozwiązanie typu Schwarzschilda dla równań Einsteina w przypadku 2+3 wymiarowej czasoprzestrzeni w teorii Kaluży-Kleina. Rozwiązanie to otrzymałem przy użyciu programu algebry symbolicznej *Mathematica*. Praca była cytowana między

innymi w książce „Space, Time and Spacetime: Physical and Philosophical Implications of Minkowski's Unification of Space and Time” (2010), z serii „Fundamental Theories of Physics” wydawanej przez Springer. Druga praca dotyczy rozszerzenia teorii grup Lie na operacje antyliniowe, w szczególności dla grupy $SL(2,C)$. Pierwsza wersja tej idei była referowana przez mnie na Sympozjum Wignerowskim w Istambule jeszcze w 1999 roku.

Prace te traktuję jako intelektualne ćwiczenie w dziedzinie bardzo dalekiej od zastosowań praktycznych i dlatego zazwyczaj nie uprawianej na Politechnikach.

* * *

Wykonałem także ekspertyzę (pracę studyjną) dla celów specjalnych na temat: „Wykorzystanie zjawiska pochłaniania pola elektromagnetycznego przez wieloczęstotliwościowe ekrany rezonansowe, dla biernej ochrony źródeł emisyjnych informacji cyfrowej w zakresie mikrofal” (2016). Praca objęta jest zakazem publikacji.

* * *

W ostatnim roku wziąłem udział w badaniach z fizyki ciała stałego dotyczących nowych faz siarczku galu. Ich wynikiem są następujące prace:

- C. Jastrzębski, K. Olkowska, D. Jastrzębski, M. Wierzbicki, W. Gębicki, S. Podsiadło, „Raman scattering studies on very thin layers of gallium sulfide (GaS) as a function of sample thickness and temperature”, *Journal of Physics Condensed Matter* **31** (2019) 075303, $IF=2,617$
- C. Jastrzębski, D. Jastrzębski, V. Kozak, K. Piętak, M. Wierzbicki, W. Gębicki, „Synthesis and structural characterization of microcrystalline Ga_2S_3 layers on a GaP semiconductor substrate”, *Materials Science in Semiconductor Processing* **94** (2019) 80-85, $IF=2,593$

Niedawno skończyłem obliczenia częstości ramanowskich dla nowej fazy siarczku cyny (Sn_2S_3), które niedługo zostaną opublikowane. Wykorzystując wymienione wyżej w autoreferacie doświadczenie naukowe chciałbym w przyszłości doprowadzić do połączenia istniejących na naszym Wydziale badań ramanowskich i badań w dziedzinie wysokich ciśnień. Dodatkowy stopień swobody jakim jest zewnętrzne ciśnienie daje znaczne zwiększenie różnorodności zjawisk fizycznych i możliwość otrzymania nowych faz badanych materiałów. Oczywiście chętnie widziałbym także możliwość kontroli drugiego stopnia swobody jakim jest temperatura, ale zejście do temperatury rzędu milikelwinów w jakiej działają komputery kwantowe wymaga znacznie większych nakładów finansowych. Wpływ ciśnienia na badany układ można także dość łatwo uwzględnić w opisie teoretycznym stosując metody fizyki statystycznej, szczególnie przy użyciu metod dynamiki molekularnej.

* * *

osiągnięcia dydaktyczne

Prowadziłem lub prowadzę zajęcia na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej z następujących kursowych przedmiotów:

- Mechanika Klasyczna,
- Mechanika Kwantowa,
- Elektrodynamika,
- Termodynamika i Fizyka Statystyczna.

Mogę pochwalić się dwoma recenzowanymi skryptami z Elektrodynamiki Klasycznej i Mechaniki Klasycznej, wydanymi w latach 2008 i 2010 przez Oficynę Wydawniczą Politechniki Warszawskiej. Z informacji, które znalazłem w Internecie wynika, że ze skryptów tych korzysta się na następujących uczelniach:

- Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej,
- Wydział Elektrotechniki i Informatyki Politechniki Rzeszowskiej,
- Wydział Fizyki Uniwersytetu w Białymstoku,
- Wydział Mechaniczny Politechniki Łódzkiej,
- Wydział Inżynierii Mechanicznej i Robotyki Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie.

Popularność tych skryptów wynika prawdopodobnie z autorskiego podejścia do tematu. W obu skryptach zawarłem jednocześnie podstawowe informacje teoretyczne i szczegółowo rozwiązane zadania. Starłem się w nich nie stosować często spotykanej w podręcznikach metody opuszczania istotnej części rachunków. W skryptach tych, a także na prowadzonych przeze mnie zajęciach, szeroko korzystam z programu *Mathematica*, pozwalającego doprowadzić bardziej skomplikowane obliczenia do końca i uzyskać przejrzyste rysunki ilustrujące fizyczną stronę problemu. Myślę, że moje skrypty nie mają wady starszych zbiorów zadań, szczególnie z mechaniki klasycznej, gdzie rozwiązanie doprowadzone jest do postaci zawikłanego wzoru, z którego tak naprawdę nic nie wynika.

Na zajęciach z Elektrodynamiki staram się także wdrożyć studentów do podejścia inżynierskiego, stosując bardzo łatwy w użyciu program z metody elementów skończonych „FEMM”, autorstwa Davida Mekkera. O tym, że studenci doceniają moje zajęcia świadczy fakt, że korzystają z nich nie tylko studenci Wydziału Fizyki PW, ale także pojawiają się na nich osoby z Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego.

Przygotowałem także przed paroma laty skrypt z Termodynamiki i Fizyki Statystycznej, w którym zastosowałem nowoczesną metodę matematyczną form różniczkowych. Niestety, skrypt ten, z przyczyn ode mnie niezależnych, nie ukazał się drukiem. Udostępniam go studentom na mojej stronie

internetowej <http://fizyka.pw.edu.pl/~wierzba>, gdzie można także znaleźć dużo dodatkowych materiałów dydaktycznych z Mechaniki Klasycznej, Mechaniki Kwantowej i Elektrodynamiki Klasycznej.

Bardzo cenię sobie trzykrotne nagrody „Złotej Kredy” za najlepiej prowadzony wykład lub ćwiczenia na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej, przyznane mi przez Samorząd Studentów PW w latach 2017 (podwójna nagroda) i 2018.

W latach 2008-2011 byłem opiekunem Koła Naukowego Fizyków na Wydziale Fizyki PW. Studenci pod moją opieką przygotowali wiele pokazów wykorzystywanych podczas imprez popularyzujących fizykę takich jak Pikniki Naukowe i Drzwi Otwarte PW oraz wykonywali pod moim nadzorem projekty badawcze i inżynierskie finansowane z grantów Rektora PW.

* * *

osiągnięcia administracyjne

Kieruję *Pracownią Modelowania Struktur Niskowymiarowych* w Zakładzie Badań Strukturalnych Wydziału Fizyki PW. Moim zdaniem tego typu Pracownia z jednej strony nie powinna prowadzić jedynie usługowych prac na rzecz eksperymentatorów, wykonując obliczenia na chwilowe zamówienie, dla wypełnienia miejsca w publikacji. Z drugiej strony badania naukowe na uczelni technicznej w szeroko rozumianej dziedzinie fizyki ciała stałego muszą mieć odniesienie do realnych zagadnień technicznych. Dyscyplina naukowa o nazwie fizyka na uczelni technicznej nie powinna być czymś w rodzaju fizyki inżynierskiej, ubogiej siostry fizyki uniwersyteckiej. Powinna to być fizyka, w pełnym znaczeniu tej dyscypliny naukowej, nauczana i rozwijana w stopniu zapewniającym rozumienie, śledzenie i wykorzystywanie wiedzy podstawowej, jak i najnowszych osiągnięć fizyki w zakresie metod badawczych i obliczeniowych w sposób przyczyniający się do rozwoju nauk technicznych. Należy pamiętać, że współczesna nanotechnologia wymaga dogłębnej znajomości mechaniki kwantowej, do niedawna dziedziny uważanej za należąca raczej do fizyki teoretycznej.

Oprócz funkcji kierownika pracowni pełnię także rolę administratora rozproszonego klastra obliczeniowego Zakładu Badań Strukturalnych, na którym pracownicy Zakładu oraz inne chętne osoby z Wydziału Fizyki PW mogą wykonywać prace nie wymagające uzyskiwania oddzielnych grantów obliczeniowych poza Wydziałem Fizyki.

Jestem członkiem komisji egzaminacyjnej prac magisterskich na Wydziale Fizyki PW, dla kierunku Fizyka Techniczna. Działam także w Komisji Programowej Wydziału Fizyki PW, recenzując zgłoszenia tematów prac inżynierskich i magisterskich. W latach 2008-2011 byłem opiekunem Koła Naukowego Fizyków na Wydziale Fizyki PW.

* * *

Na koniec załączam skrótową informację bibliometryczną o moim dorobku naukowym podaną przez serwis Web of Science na dzień 7.04.2019

- liczba prac naukowych 42
- całkowita liczba cytowań 487 (bez samocytowań 438)
- współczynnik Hirscha 9
- średnia liczba cytowań na pracę 11,6

Sumaryczny impact factor według Journal Citation Reports wynosi 76,0

Wierzbicki

.....
Michał Wierzbicki