

Prof. dr hab. Marcin Mierzejewski
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Podstawowych Problemów Techniki
Politechnika Wrocławska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr. Ananda Manaparambila pt.
“Nonequilibrium transport and Kondo correlations in nanoscale systems”.

Rozprawę doktorską Pana mgr. Ananda Manaparambila stanowi cykl pięciu publikacji oraz jeden artykuł, które obecnie dostępny jest na platformie arXiv. Głównym celem tych prac jest teoretyczna analiza transportu ładunku, spinu i energii, przez kropkę kwantową, poza reżimem liniowej odpowiedzi. Opis nierównowagowego transportu przez kropkę kwantową, który precyzyjnie uwzględnia korelacje kulombowskie odpowiedzialne za efekt Kondo, przez wiele lat stanowił istotne wyzwanie dla fizyki teoretycznej. W warunkach równowagi termodynamicznej, jeden z najbardziej precyzyjnych opisów transportu oparty jest o numeryczną grupę renormalizacji (NRG), jednak było dalece nieoczywiste w jaki sposób uzyskane w tym podejściu wyniki można uogólnić na przypadek fizyki nierównowagowej. Istotnym krokiem w tym kierunku było opracowanie hybrydowej metody łączącej NRG z nierównowagową dynamiką opartą o grupę renormalizacji macierzy gęstości (*time-dependent density matrix renormalization group, tDMRG*). tDMRG jest obecnie uważana za jedno z najdokładniejszych podejść, które umożliwia wyznaczenie ewolucji stosunkowo dużych niskowymiarowych układów kwantowych. Metoda hybrydowa łącząca NRG z tDMRG została opublikowana w *Physical Review Letters* w 2018 r. Autorami tej pracy jest promotor recenzowanej rozprawy, Prof. Ireneusz Weymann, F. Schwarz, J. von Delft oraz A. Weichselbaum. Ostatni dwaj fizycy są współautorami także dwóch prac będących częścią omawianej rozprawy doktorskiej, w których wykorzystywana jest metoda hybrydowa. Autorami pozostałych czterech prac są jedynie mgr. Anand Manaparambil oraz Prof. Weymann. Pan Anand Manaparambil jest pierwszym autorem wszystkich prac wchodzących w skład rozprawy a dołączone oświadczenia współautorów jednoznacznie wskazują, że wniósł on dominujący wkład w ich powstanie. Nie mam żadnych wątpliwości, że zbudowanie rozprawy doktorskiej Pana mgr. Ananda Manaparambila w oparciu o te prace jest w pełni uzasadnione.

Rozprawę rozpoczyna krótki rozdział, w którym precyzyjnie wskazano motywację badań naukowych oraz cele badawcze rozprawy. Nie mam wątpliwości, że cele te zostały w pełni zrealizowane, co postaram się uzasadnić w dalszej części recenzji. Kolejne dwa rozdziały (drugi i trzeci) stanowią wstęp, w którym omówione zostały podstawowe zagadnienia dotyczące zjawisk transportu przez nanoukłady. W szczególności, w drugim rozdziale omówiony został model Andersona pojedynczej domieszki oraz transport przez kropkę kwantową, w przypadku gdy można zaniedbać oddziaływania kulombowskie. W rozdziale trzecim przytoczono najważniejsze informacje dotyczące efektu Kondo, metody NRG oraz zjawisk transportu w reżimie liniowej

odpowiedzi z uwzględnieniem przewodności elektrycznej i cieplnej oraz termoelektryczności opisywanej przy pomocy współczynnika Seebecka.

Czwarty rozdział poświęcony jest omówieniu metod numerycznych, które były wykorzystywane w rozprawie. W drugiej części tego rozdziału precyzyjnie przedstawiono podejście perturbacyjne, które było używane do opisu silnie asymetrycznego sprzężenia kropki kwantowej z elektrodami. Natomiast pierwsza część rozdziału czwartego poświęcona jest omówieniu hybrydowej metody NRG-tDMRG. Opis jest przejrzysty i pozwala czytelnikowi zbudować intuicję fizyczną dotyczącą tej metody. Pewien niedosyt budzi jednak brak szczegółów technicznych, które mogły zostać omówiono w szerszym zakresie i bardziej szczegółowo, niż ma to miejsce w przypadku typowych publikacji. Każda metoda numeryczna ma swoje ograniczenia, jednak nie znalazłem zbyt wielu informacji dotyczących ograniczeń NRG-tDMRG. Przypuszczam (choć mogę się mylić), że głównym ograniczeniem tej metody jest czas propagacji dostępny w tDMRG oraz kryterium pozwalające stwierdzić czy w dostępnym oknie czasowym układ osiągnął stan stacjonarny. Pewne informacje na ten temat zostały przedstawione na rysunku 4.2 (strona 25). Zastanawia mnie czy stan układu, dla którego prądy wyznaczone dla lewej i prawej elektrody istotnie się do siebie różnią, można uznać za dobre przybliżenie stanu stacjonarnego. W odróżnieniu od publikacji, rozprawa doktorska daje możliwość bardziej szczegółowego omówienia tego typu zagadnień i szkoda, że autor tej szansy nie wykorzystał. Jest to główna i w zasadzie jedyna krytyczna uwaga dotycząca recenzowanej rozprawy doktorskiej. Warto podkreślić, że wszystkie publikacje wchodzące w skład rozprawy zostały świetnie zredagowane. Motywacja badań, sposób ich przeprowadzenia oraz opis najważniejszych wyników zostały w nich opisane w sposób precyzyjny i przejrzysty. Najważniejsze wyniki tych prac zostały krótko podsumowane w piątym rozdziale rozprawy.

Przejdę teraz do omówienia najważniejszych wyników przedstawionych w publikacjach, które stanowią rozprawę doktorską. Publikacje te zostały podzielone na trzy grupy, które odzwierciedlają fizyczne aspekty badanych układów. Moim zdaniem odzwierciedlają one także złożoność badanych zjawisk i związaną z nią skalę trudności.

Pierwsza z prac stanowiących rozprawę została opublikowana w 2021 r. w *Scientific Reports*. Jest to jedyna praca wchodząca w skład rozprawy, która w całości koncentruje się na reżimie liniowej odpowiedzi. Badany był transport ładunku oraz ciepła przez molekułę magnetyczną, modelowaną jako pojedynczy poziom orbitalny, który jest sprzężony ze spinem $s=1$ poprzez oddziaływanie wymienne. Własności transportowe zostały wyznaczone w oparciu o NRG i uwzględniały szereg efektów, takich anizotropię magnetyczną i magnetyczną polaryzację elektrod, oraz skal energetycznych takich jak temperatura Kondo, pole wymiany wnikające z obecności ferromagnetycznych elektrod i oddziaływanie wymienne wewnątrz magnetycznej molekuly. Moim zdaniem, najciekawsze wyniki tej pracy dotyczą zależności własności transportowych od typu oddziaływania wymiennego wewnątrz molekuly magnetycznej. Podczas gdy oddziaływanie ferromagnetyczne prowadzi głównie do zmian ilościowych, to w przypadku oddziaływania antyferromagnetycznego widoczne są jakościowe zmiany przewodnictwa oraz współczynnika Seebecka. Z dużym zainteresowaniem przeczytałem także ostatnią część tej publikacji dotyczącą spinowego efektu Seebecka, który pojawia się w przypadku gdy czas relaksacji spinu w elektrodach jest dostatecznie długi aby pojawiła się tam akumulacja spinu.

Kolejne dwie prace poświęcone są analizie własności transportowych w reżimie nierównowagowym, którego analiza stanowi szczególnie trudne wyzwanie. W obu przypadkach

obliczenia numeryczne zostały wykonane w oparciu o metodę hybrydową NRG-tDMRG. Pierwsza z tych prac została opublikowana w *Phys. Rev. B.* w 2022 r. i została wyróżniona przez edytorów czasopisma jako *Editor's Suggestion*. Głównym celem tej pracy była analiza transportu nierównowagowego przez kropkę kwantową w przypadku gdy elektrody są spolaryzowane magnetycznie a efekty nierównowagowe wynikają ze skończonej różnicy potencjałów pomiędzy elektrodami. Jeden z ciekawszych wyników dotyczy różnicy potencjałów związanych z efektem Kondo, V_K , który został zdefiniowany jako różnica potencjałów, dla której przewodnictwo różniczkowe maleje o połowę w stosunku do wartości równowagowej. W przypadku symetrii cząstka-dziura, V_K maleje wraz z polaryzacją elektrod w ten sam sposób jak temperatura Kondo wyznaczona w reżimie równowagowym z NRG. Przy braku symetrii cząstka-dziura, efektywne pole wymiany wynikające z bliskości ferromagnetycznych elektrod prowadzi do rozszczepienia piku w przewodnictwie różniczkowym, które, jak pokazano, można kontrolować poprzez zewnętrzne pole magnetyczne.

Druga z prac opartych o metodę hybrydową NRG-tDMRG jest obecnie dostępna na platformie arXiv. Moim zdaniem jest to najciekawsza praca, która jest częścią recenzowanej rozprawy. Główny celem tej pracy jest analiza transportu ładunku oraz ciepła przez kropkę kwantową symetrycznie sprzężoną z dwiema elektrodami o różnych temperaturach. Pracę rozpoczyna analiza własności transportowych wyznaczonych bez uwzględnienia korelacji kulombowskich. Świetna zgodność wyników numerycznych z wynikami analitycznymi pokazuje ogromny potencjał hybrydowej metody NRG-tDMRG w reżimie nierównowagowym. Blisko równowagi termodynamicznej metoda hybrydowa precyzyjnie odtwarza wyniki numeryczne uzyskane przy pomocy NRG z uwzględnieniem oddziaływania kulombowskiego. Oba testy jednoznacznie wskazują, że hybrydowa metoda NRG-tDMRG może dostarczyć wiarygodnych ilościowych danych dotyczących fizyki efektu Kondo poza równowagą termodynamiczną. Dla niewielkich napięć pokazano, że własności transportowe kropki sprzężonej z elektrodami o różnych temperaturach są bardzo bliskie własnościom równowagowym wyznaczonym dla temperatury efektywnej, która jest średnią kwadratową temperatur obu elektrod. Pojawia się pytanie o interpretację tego nieoczywistego wyniku i głębsze zrozumienie własności otrzymanego nierównowagowego stanu stacjonarnego.

Ostatnia grupa prac analizuje własności transportowe w sytuacji, gdy kropka kwantowa jest sprzężona asymetrycznie z dwiema elektrodami. W tym przypadku także możemy mieć do czynienia z reżimem nierównowagowym, lecz koncepcyjnie taka sytuacja jest znacznie prostsza niż w opisanym wcześniej przypadku gdy sprzężenie jest symetryczne. W przypadku silnie asymetrycznego sprzężenia kropka kwantowa i silnie z nią sprzężona elektroda są w równowadze termodynamicznej i mogą być badane przy pomocy NRG. Transport pomiędzy elektrodami można następnie analizować perturbacyjnie na poziomie odpowiadającym złotej regule Fermiego, co zostało precyzyjnie opisane w rozprawie w rozdziale 4.2. Omawiane prace zostały opublikowane w latach 2023-2024 w *Physical Review B* (dwie prace) oraz w *J. Magn. Magn. Matter* (jedna praca). Celem pierwszej z ww. prac była analiza transportu ładunku i ciepła oraz efektów termoelektrycznych poza reżimem liniowej odpowiedzi. W tym celu numerycznie wyznaczono nieliniowy współczynnik Seebecka oraz różniczkowy współczynnik Seebecka. Wskazano parametry, przy których wielkości te zmieniają znak, co udało się powiązać z korelacjami Kondo, które pozostają widoczne także w reżimie nierównowagowym. Badano także działanie nanoukładu pracującego jako silnik cieplny i wskazano, że przy odpowiednio dobranych parametrach jego

sprawność może osiągnąć ok. 80% sprawności silnika Carnota. W kolejnej pracy opublikowanej w *Physical Review B* rozważania te zostały uogólnione na przypadek magnetycznie spolaryzowanych elektrod. W takiej sytuacji pojawia się dodatkowa skala energetyczna. Jest nią pole wymiany wnikaające z obecności ferromagnetycznej silnie sprzężonej elektrody, które rozszczepia rezonans Kondo i prowadzi do zmiany znaku współczynników Seebecka (różniczkowego i nieliniowego). Zbadano także spinowy efekt Seebecka występujący wówczas gdy czas relaksacji spinu w elektrodach jest duży i pojawia się tam akumulacja spinu. Badane zagadnienia są zbliżone tematycznie do pierwszej publikacji w *Scientific Reports*, jednak dotyczą transportu nierównowagowego poza reżimem liniowej odpowiedzi. Ostatnia z prac stanowiących rozprawę poświęcona jest analizie magnetooporu tunelowego w takim samym układzie fizycznym. W przypadku symetrii cząstka-dziura, prąd tunelowy słabo zależy od wzajemnej polaryzacji elektrod. Silna zależność pojawia się natomiast w przypadku braku symetrii cząstka-dziura. Okazuje się, że prądy wyznaczone przy równoległej oraz antyrównoległej polaryzacji elektrod zmieniają znak przy innych temperaturach i napięciach elektrod. Oznacza to, że dla odpowiednio dobranych parametrów układu, iloraz tych dwóch prądów może przyjmować bardzo duże wartości.

Uważam, że rozprawa doktorska Pana Ananda Manaparambila spełnia wszystkie wymagania stawiane kandydatom w Ustawie *Prawo o szkolnictwie wyższym i Nauce* z dnia 20 lipca 2018 r. Rozprawę stanowi zbiór opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych, w których zaprezentowano oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, który dotyczy nierównowagowego transportu w układach z korelacjami Kondo. Rozprawa prezentuje szeroką wiedzę kandydata w dyscyplinie oraz umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej. Z tego powodu wnioskuję o przyjęcie recenzowanej rozprawy i dopuszczenie jej autora do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Wnioskuję też o wyróżnienie recenzowanej rozprawy. Poniżej zamieszczam uzasadnienie tego wniosku.



Wniosek o wyróżnienie rozprawy doktorskiej Pana mgr. Ananda Manaparambila

W mojej ocenie, wyniki naukowe przedstawione w rozprawie doktorskiej Pana mgr. Ananda Manaparambila wnoszą istotny wkład do zrozumienia zjawisk transportu w układach z korelacjami Kondo. Opis nierównowagowego transportu ładunku, ciepła i spinu w tych układach przez wiele lat stanowił istotne wyzwanie dla fizyki teoretycznej. Prace Pana Manaparambila stanowią ciekawe i stosunkowo szerokie opracowanie tego problemu. Prace te były cytowane ok 30 razy (wg. *Google scholar*) zostały zatem dostrzeżone przez środowisko naukowe. Należy też podkreślić wyjątkowo bogatą listę prezentacji konferencyjnych oraz seminariów wygłoszonych przez doktoranta, jego bogatą współpracę międzynarodową oraz fakt uzyskania środków finansowych w ramach dwóch projektów (NAWA i NCN). Biorąc pod uwagę efekty dotychczasowej działalności naukowej Pana mgr. Ananda Manaparambila oraz poziom naukowy jego rozprawy doktorskiej wnioskuję o wyróżnienie tej rozprawy.

