



Recenzja rozprawy doktorskiej mgr inż. Aliny Mreńcy-Kolasińskiej
Symulacje transportu kwantowego w układach grafenowych ze złączami n-p

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska pt. „*Symulacje transportu kwantowego w układach grafenowych ze złączami n-p*” została przygotowana pod kierunkiem prof. dr. hab. inż. Bartłomieja Szafrana na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie. Tematyka dysertacji dotyczy badań teoretycznych transportu kwantowego w układach dwuwymiarowych opartych na grafenie, ze szczególnym uwzględnieniem złącz typu n-p indukowanych potencjałem ostrza mikroskopu bramki skanującej. Grafen, dzięki swoim unikalnym własnościom elektrycznym i mechanicznym, jest materiałem bardzo perspektywnym, zwłaszcza jeżeli chodzi o zastosowania w nanoelektronice, spintronice, czy też w technologiach przechowywania i przetwarzania informacji. Choć od jego odkrycia upłynęło kilkanaście lat, grafen, poprzez odpowiednią strukturyzację bądź też różnego typu efekty bliskości, wciąż pozwala na eksplorację nowych zjawisk, do których opisu i zrozumienia konieczne jest opracowanie nowych teorii czy też przeprowadzenie zaawansowanych symulacji numerycznych. Dlatego też badania grafenu oraz innych układów dwuwymiarowych są intensywnie prowadzone w czołowych laboratoriach na świecie. Problematyka podjęta przez doktorantkę niewątpliwie wpisuje się w ten nurt. W swojej pracy doktorskiej mgr Mreńca-Kolasińska uzyskała szereg ciekawych i oryginalnych rezultatów dotyczących własności transportowych złącz typu n-p opartych na grafenie. Doktorantka rozważała szerokie spektrum zagadnień, poczynając od analizy wpływu bramki skanującej na stany związane w grafenowych wstęgach i kwantowych kontaktach punktowych, poprzez zjawiska interferencyjne, takie jak efekt Aharonova-Bohma, w pierścieniach grafenowych, do kwantowego efektu Halla. Wyniki uzyskane w ramach dysertacji zostały opublikowane w renomowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym, były także prezentowane podczas wielu konferencji naukowych i seminariów. Świadczy to niewątpliwie o trafności i ważkości podjętej problematyki, a także o dużym zaangażowaniu doktorantki w prace badawcze.

Dysertacja ma formę jednotematycznego cyklu składającego się z pięciu prac naukowych, z których cztery prace ukazały się w *Physical Review B* oraz jeden artykuł został opublikowany w *Semiconductor Science and Technology*. W czterech artykułach doktorantka jest pierwszym autorem, natomiast w jednej pracy jest drugim autorem, przy czym jest to praca doświadczalnie-teoretyczna, a doktorantka jest pierwszym autorem jeżeli chodzi o teorię. W załączonej dokumentacji nie znalazłem oświadczeń wszystkich

współautorów do prac A.3 i A.5. Z dostępnych oświadczeń wynika jednak, iż wkład mgr Mreńcy-Kolasińskiej w powstanie tych prac był dominujący (w pracy A.5 dotyczy to strony teoretycznej). Przedstawiony cykl spełnia zatem formalne wymogi ustawy o stopniach i tytułach naukowych.

Rozprawa składa się z dwóch części. Pierwsza część stanowi swego rodzaju wprowadzenie do cyklu prac i jest zbudowana z czterech rozdziałów. W pierwszym rozdziale autorka przedstawia motywację oraz kontekst pracy, natomiast rozdział drugi zawiera krótkie przedstawienie podstawowych celów pracy doktorskiej. Rozdział trzeci to streszczenie kolejnych artykułów stanowiących dysertację, a podsumowanie i wnioski są przedstawione w rozdziale czwartym, po którym następuje spis literatury. Na końcu, w formie dodatków, doktorantka podaje pełen spis swoich publikacji, listę odbytych staży naukowych, konferencji naukowych oraz projektów badawczych, w których uczestniczyła. Chociaż forma dysertacji oparta o cykl publikacji naukowych raczej nie zachęca do przygotowania szerszego wprowadzenia do podjętej problematyki, moim zdaniem warto o taki zadbać, tak aby praca doktorska posiadała także pewne walory dydaktyczne, istotne dla czytelników niezaznajomionych z tematyką. Pod tym względem lektura pierwszej części doktoratu pozostawia pewien niedosyt. W doktoracie w zasadzie brakuje szerszego wprowadzenia do problematyki układów dwuwymiarowych takich jak grafen, a w szczególności własności transportowych grafenu i podstawowych zjawisk obserwowanych w płatkach czy też wstęgach grafenowych. Autorka nie precyzuje dokładnie czym charakteryzują się badane układy, jakie modele są stosowane do ich opisu, jakie metody badawcze są wykorzystywane oraz jakie są zalety i ograniczenia stosowanych metod. Kolejne aspekty wymagające szerszego komentarza dotyczą chociażby tego jak własności badanych nanostruktur grafenowych zależą od rozmiarów i brzegów grafenu? Pytanie to jest o tyle istotne, że występowanie badanych w dysertacji zjawisk silnie zależy od rodzaju brzegów grafenu. Jaka jest od strony doświadczalnej motywacja do badania konkretnych kształtów płatków i wstęg grafenowych (na ile i jak dokładnie da się takie układy strukturyzować)? Własności grafenu mogą ulec istotnym zmianom także poprzez efekt bliskości (np. od podłoża) – jaki jest wpływ podłoża/otoczenia na grafen i badane zjawiska? Jak wpływa na nie temperatura? W dysertacji badana jest możliwość obrazowania modów w płatkach grafenu przy pomocy sondy bramki skanującej, jednak brak dokładnego wyjaśnienia na czym technika bramki skanującej polega, jak i w jakich warunkach przeprowadza się pomiar oraz co można tą metodą zmierzyć. Zdaję sobie sprawę, że część z tych informacji można znaleźć w samych publikacjach lub ich referencjach, uważam jednak, że we wprowadzeniu można było w bardziej kompleksowy sposób przedstawić te zagadnienia oraz zamieścić szczegóły, których zwykle nie umieszcza się w publikacjach naukowych. Podczas obrony chciałbym, aby doktorantka postarała się te braki uzupełnić.

Cześć pierwsza posiada także pewne mankamenty edytorskie. Otóż, sam spis treści dysertacji jest dość mylący. Nie zawarto w nim głównej części doktoratu, tj. cyklu publikacji naukowych, stąd można odnieść wrażenie, że doktorat kończy się na stronie 29. Poza tym, ze spisu treści wynika, że rozdział 4 *Podsumowanie i wnioski* obejmuje pięć stron, podczas gdy podsumowanie dysertacji wraz z wnioskami przedstawiono w dość lapidarny sposób na jednej stronie, a na kolejnych jest spis literatury. Ponadto, wymiar we wzorach (4)-(6) na opór podłużny złącza jest nieprawidłowy.

Druga część rozprawy to już zasadnicza część doktoratu, którą stanowi cykl pięciu publikacji naukowych przedstawiających oryginalne wyniki badań przeprowadzonych przez doktorantkę. Chciałbym podkreślić, że wszystkie prace ukazały się w bardzo prestiżowych czasopiśmie naukowych i zostały już poddane wnikliwemu procesowi recenzowania. Poza tym, część z prac została już także zauważona przez środowisko naukowe, np. praca A.2 była cytowana 4 razy, a praca A.3 3 razy. Dlatego też nie będę tych prac szczegółowo omawiał tylko skupię się na najciekawszych moim zdaniem aspektach. Krótkie omówienie zasadniczego celu każdej z prac oraz najważniejszych wyników jest przedstawione w rozdziale trzecim pierwszej części doktoratu i daje dobre rozeznanie o zawartości każdej publikacji.

Pierwsza praca A.1 *Imaging the localization of the quasi-bound states in graphene antidots* dotyczy badania transportu przez płatki grafenowe, w których centrum indukowana jest bariera potencjału (anty kropka), dołączone do kontaktów, którymi są metaliczne wstęgi grafenowe typu *krzeselkowego (armchair)*. Przewodność takiej nanostruktury wykazuje wyraźne piki rezonansowe związane z obecnością stanów związanych w płatku grafenu. W pracy skupiono się na zbadaniu lokalizacji stanów związanych w zależności od parametrów i kształtu bariery potencjału przy pomocy techniki mikroskopii bramki skanującej. Grafen modelowano przy pomocy hamiltonianu ciasnego wiązania, natomiast przewodność wyznaczono stosując dwuterminalową formułę Landauera. Badając wpływ bramki skanującej na stany rezonansowe stwierdzono, iż obecność sondy prowadzi do ich przesunięcia. Ta obserwacja doprowadziła do zaproponowania zmodyfikowanej metody obrazowania, w której bada się mapę przesunięć rezonansów spowodowanych obecnością sondy skanującej. Ciekawą obserwacją jest stwierdzenie wydłużenia czasu życia stanów związanych w obrębie złącza n-p wskutek obecności sondy o około jeden rząd wielkości. Wynik ten jest o tyle zaskakujący, że obecność sondy wprowadza zaburzenie do układu i obniża symetrię antykropki, stąd można by raczej oczekiwać skrócenia czasu życia stanów związanych. Jaki jest fizyczny mechanizm zamiany czasu życia tych stanów i co dzieje się ze stanami zlokalizowanymi poza antykropką?

Kolejna praca, A.2 *Conductance response of graphene nanoribbons and quantum point contacts in scanning gate measurements*, przedstawia kompleksowe badania wpływu obecności bramki skanującej na przewodność „nanożeberek” grafenowych oraz kwantowych kontaktów punktowych wytworzonych w przewężeniach wstęg grafenowych. Podobnie jak w poprzedniej pracy, badania przewodności przeprowadzono w ramach teorii ciasnego wiązania stosując formalizm Landauera. W przypadku jednorodnych wstęg grafenowych typu *zigzag* pokazano, iż w zależności od położenia ostrza mikroskopu przewodność układu może ulec zmniejszeniu wtedy, gdy potencjał ostrza sięga krawędzi wstęgi, co prowadzi do powstania złącza typu n-p i tzw. rozpraszania międzypolinowego. Takiego rozpraszania nie obserwuje się natomiast dla wstęg metalicznych. Dla kwantowych kontaktów punktowych utworzonych z dłuższych przewężeń pokazano, iż tworzą się w nich stany rezonansowe, które prowadzą do pojawienia się charakterystycznych pików w przewodności. Natomiast dla krótszych przewężeń stany rezonansowe nie występują, a współczynnik transmisji zmienia się w sposób ciągły.

W trzeciej publikacji, A.3 *Aharonov-Bohm interferometer based on n-p junctions in graphene nanoribbons*, doktorantka analizowała zjawisko interferencji Aharonova-Bohma w złączu grafenowym n-p, które jest generowane poprzez potencjał ostrza mikroskopu. Do układu przyłożone jest wysokie pole magnetyczne, które prowadzi do powstania

kwantowego efektu Halla. Przy odpowiednich rozmiarach złącza n-p następuje interferencja pomiędzy prądami krawędziowymi a prądami płynącymi wokół złącza n-p. Prowadzi to do obserwacji ciekawego zjawiska interferencji kwantowej pomiędzy wiązkami, którym można sterować między innymi poprzez potencjał bramki skanującej. Autorka pokazuje, że amplituda oscylacji Aharonova-Bohma silnie zależy od typu wstęgi grafenowej. Dla półprzewodnikowych wstęp typu *krzeselkowego* oscylacje są dużo bardziej widoczne niż dla wstęp metalicznych. W tym pierwszym przypadku, z analizy fourierowskiej wynika, że pojawiają się wielokrotne okrążenia elektronów wokół pierścienia stworzonego przez złącze n-p. Nasuwa się tutaj pytanie czy można w badanym układzie zidentyfikować trajektorie dające wkład podobny do zjawiska słabej lokalizacji?

Czwarta praca, A.4 *Lorentz force effects for graphene Aharonov-Bohm interferometers*, jest w pewnym sensie kontynuacją i rozszerzeniem poprzedniej pracy A.3. Doktorantka porównuje w niej interferometr Aharonova-Bohma stworzony na bazie złącza indukowanego obecnością potencjału bramki skanującej (układ z pracy A.3) z interferometrem stworzonym z pierścienia grafenowego. W pracy stwierdzono występowanie istotnej różnicy pomiędzy dwoma interferometrami. Dla ringu Aharonova-Bohma wytrawionego w grafenie występują dwa typy stanów wewnątrz pierścienia, związanych z prądami krążącymi w przeciwnych kierunkach. Natomiast w przypadku ringu wytworzonego przy pomocy potencjału ostrza bramki skanującej, prąd płynie tylko w jednym kierunku. W pracy przedyskutowano także możliwość generacji oscylacji Aharonova-Bohma dla pierścieni stworzonych na wstęgach typu *zigzag*. Doktorantka pokazała, że oscylacje mogą wystąpić, gdy w grafenie pojawi się rozpraszanie międzycielinowe, a także gdy w układzie istnieje krótkozasięgowy nieporządek.

Ostatnia praca z cyklu, tj. A.5 *Interedge backscattering in buried split-gate-defined graphene quantum point contacts*, jest pracą teoretyczno-eksperymentalną dotyczącą własności transportowych kwantowych kontaktów punktowych opartych na złączach grafenowych w obszarze kwantowego efektu Halla. Praca ta jest w pewnym sensie uwieńczeniem badań prowadzonych przez doktorantkę. Jak wynika z oświadczenia Promotora, wkład mgr Mreńcy-Kolasińskiej w jej powstanie był bardzo istotny i polegał na opracowaniu modelu teoretycznego i wykonaniu obliczeń, bez których nie dałoby się zrozumieć danych eksperymentalnych, a zatem praca nie byłaby publikowalna. Artykuł ten jest świetnym dowodem na to, że badania prowadzone przez doktorantkę są ważne dla eksperymentatorów, a rozwijane teorie mogą być z powodzeniem stosowane do wyjaśnienia obserwacji doświadczalnych. W pracy uogólniono stosowany w poprzednich publikacjach formalizm Landauera do opisu układów wieloterminalowych z różnym współczynnikiem zapełniania zależnym od obszaru próbki. Ponieważ rozmiary badanego eksperymentalnie układu były na tyle duże, że koherencja transportu nie była zachowana, w obliczeniach uwzględniono dekoherencję poprzez zastosowanie tzw. sond Büttikera. Dla odpowiednio długich złącz, dekoherencja prowadzi do ustalenia się równowagi pomiędzy modami elektronowymi i dziurowymi na końcach złącza. Uwzględnienie procesów rozfazowywania okazało się kluczowe do uzyskania wartości oporności złącza zgodnych z tymi obserwowanymi eksperymentalnie.

Opisując poszczególne elementy rozprawy podniosłem już kilka kwestii, które, mam nadzieję, zostaną poruszone i omówione podczas obrony. Dodatkowo, chciałbym, aby doktorantka ustosunkowała się do poniższych pytań. Potencjał ostrza sondy skanującej był

opisywany funkcją Lorentza. Na ile idealistyczne jest to założenie i czy ma ono wpływ na badane zjawiska, z jaką dokładnością można odtworzyć dane eksperymentalne modelując w ten sposób potencjał ostrza? Do opisu grafenu stosowano hamiltonian ciasnego wiązania z uwzględnieniem przeskoku pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Oddziaływania kulombowskie na węzle, które są porównywalne z całą przeskoku, mogą prowadzić do powstania stanów magnetycznych w płatkach grafenowych [Rep. Prog. Phys. **73**, 056501 (2010)]. Uwzględnienie oddziaływania kulombowskiego w sposób systematyczny prowadzi do znacznych komplikacji obliczeniowych (model Hubbarda), można to jednak zrobić prościej na poziomie przybliżenia pola średniego. Dlaczego w modelowaniu grafenu nie uwzględniono parametru korelacji kulombowskich i czy można oszacować jak uwzględnienie korelacji wpłynęłoby na obserwowane zjawiska? Rozmiary rozpatrywanych układów są stosunkowo małe, czy i kiedy w badaniu transportu można zaniedbać zjawiska związane z efektami dyskretnego ładowania pojedynczymi elektronami?

W podsumowaniu stwierdzam, iż praca doktorska zawiera szereg nowych i ciekawych wyników teoretycznych dotyczących własności transportowych nanostruktur opartych na grafenie. Na wyróżnienie zasługuje fakt, iż doktorantka jest już współautorką 11 artykułów naukowych, z których 8 ukazało się w *Physical Review B* – jednym z najlepszych czasopism branżowych. Wyniki uzyskane przez doktorantkę były także prezentowane na blisko dziesięciu konferencjach o zasięgu międzynarodowym zarówno w formie referatów, jak i w formie plakatowej. Badania były prowadzone w ramach dwóch projektów NCN typu Opus. Doktorantka uzyskała także stypendium NCN Etiuda, które pozwoliło jej na odbycie półrocznego stażu w National Enterprise for NanoScience and NanoTechnology w Pizie we Włoszech. Podczas stażu kandydatka pracowała nad teoretycznym wyjaśnieniem wyników eksperymentalnych dotyczących transportu przez kwantowe kontakty punktowe oparte na grafenie w obszarze kwantowego efektu Halla. Ponadto, jak wynika z oświadczenia, doktorantka brała również czynny udział w fabrykacji próbek i samych pomiarach. Jest to niewątpliwie dowód na to, iż kandydatka potrafi nie tylko wykonać złożone obliczenia transportu kwantowego w grafenie, ale z pewnością ma także szerokie rozeznanie wśród zawiłości technik eksperymentalnych stosowanych do pomiaru obliczanych wielkości. **Wszystko to sprawia, że przedstawioną do recenzji rozprawę doktorską, którą stanowi cykl pięciu prac naukowych, oceniam bardzo wysoko. Wnioskuje wobec tego o dopuszczenie mgr inż. Aliny Mreńcy-Kolasińskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego, a w przypadku zadowolającego przebiegu obrony doktorskiej chciałbym postawić wniosek o wyróżnienie dysertacji.**

prof. UAM dr hab. Ireneusz Weymann

07.08.2017

