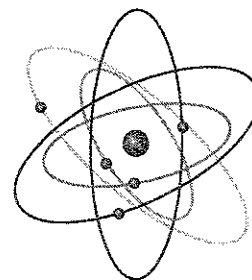


dr hab. inż. Bartłomiej J. Spisak
email: bjs@agh.edu.pl
tel. +48 12 617 44 71

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Katedra Informatyki Stosowanej i Fizyki Komputerowej
Zespół Teorii Nanostruktur i Nanourządzeń



Recenzja rozprawy doktorskiej

mgr. inż. Artura Działo

pt.: Przewodnictwo elektryczne nanostruktur metalicznych

Rozprawa doktorska Pana mgr. inż. Artura Działo zatytułowana *Przewodnictwo elektryczne nanostruktur metalicznych* dotyczy opisu teoretycznego wybranych aspektów transportu elektronowego w układach niskowymiarowych, przy założeniu geometrii CIP. Autor rozprawy skoncentrował się na zbadaniu wpływu drgań termicznych sieci oraz domieszek na przewodnictwo elektronowe cienkich warstw metalicznych w ramach teorii liniowej odpowiedzi, sformułowanej za pomocą metody kinetycznej opartej na zlinearyzowanym równaniu Boltzmann'a.

Praca liczy 74 strony i składa się ze wstępu, pięciu rozdziałów, podsumowania, dodatku matematyczno-fizycznego oraz spisu literatury. Strona edytorska pracy w tym jakość rysunków, czy składnia wzorów w zasadzie nie budzą zastrzeżeń. Tekst rozprawy jest poprawnie zredagowany z zachowaniem rygorów języka naukowego, choć czasami zdarzają się niezręczne sformułowania, czy też wyrażenia potoczne. Nie mają one jednak żadnego wpływu na ocenę merytoryczną pracy.

Recenzowana praca doktorska powstała pod kierownictwem dr. hab. Antoniego Paji – profesora AGH w Katedrze Fizyki Ciała Stałego. Została ona poprzedzona dwoma publikacjami w recenzowanych czasopismach naukowych znajdujących się na liście ministerialnej (*Acta Physica Polonica A*) oraz jednym raportem opublikowanym w materiałach z warsztatów naukowych ISD. Do działalności naukowej p. Artura Działo należy jeszcze dodać udział w trzech konferencjach i czterech warsztatach naukowych, gdzie prezentował zarówno referaty, jak i postery.

Ocenę merytoryczną pracy rozpocznę od nakreślenia jej ogólnej struktury. Temat podjęty przez Autora jest złożonym zagadnieniem teoretycznym łączącym w sobie elementy mechaniki kwantowej i mechaniki statystycznej. Dodatkową jego komplikację stanowi badany układ, czyli metaliczna cienka warstwa. Sukces leży zatem nie tylko w modelowaniu układu i odpowiednio dobranych metodach obliczeniowych, lecz również w umiejętnym stosowaniu przybliżeń.

Praca rozpoczyna się od przyjęcia geometrycznego modelu cienkiej warstwy w postaci prostopadłościanu o bardzo małej grubości w której jest uwięziony gaz elektronowy. Ze względu na kwantowy efekt rozmiarowy (grubość warstwy jest rzędu kilku stałych sieciowych) należy oczekiwać, że widmo energetyczne tego gazu powinno zostać skwantowane w kierunku wzrostu warstwy. Tę cechę widma Autor uzyskuje analitycznie przez przyjęcie uwięzienia w postaci nieskończonej studni potencjału w kierunku wzrostu warstwy. W najprostszym przybliżeniu taki model wydaje się być poprawny, ze względu na zakres energii opisywanych zjawisk, choć moje wątpliwości budzi fakt zaniedbania stanów powierzchniowych, które mogą w istotny sposób modyfikować własności elektronowe, w tym transport ładunku w takiej warstwie. W dalszej części Autor podejmuje ciekawą dyskusję dotyczącą zmiany gęstości stanów elektronowych przy przejściu od cienkiej warstwy do układu litego i w konsekwencji przedstawia zmiany wektora falowego w funkcji grubości warstwy (rys. 1.4). Jednakże, ze względu na charakter pracy (teoretyczna), kluczowy dla tego rozdziału wzór (1.6) został podany bez należytego komentarza do wyprowadzenia.

W następnym rozdziale pracy, Autor wyprowadza zlinearyzowane równanie Boltzmanna, koncentrując się na uzasadnieniu przybliżenia czasu relaksacji. W gruncie rzeczy jest to klasyczna dyskusja równania kinetycznego, więc jej znaczenie dla pracy ma wartość dydaktyczną, z drugiej jednak strony jest to metodologicznie uzasadnione ze względu na podjętą tematykę. Warto jednak zwrócić uwagę Autora, iż pominął w podanym przez siebie wyprowadzeniu dyskusję zakresu stosowalności równania Boltzmanna. To zagadnienie jest ściśle związane z wynikami poprzedniego rozdziału, ale Autor też nic o tym nie wspomina. W związku z powyższymi uwagami, proszę o podanie zakresu stosowalności równania Boltzmanna, bo stwierdzenie na stronie 9: „*Jest ono także używane do układów silnie ograniczonych wymiarowo pod warunkiem, że transport odbywa się w kierunkach swobodnych*” jest niewystarczające.

Kolejny rozdział pracy dotyczy opisu dynamiki sieci. Autor wprowadza koncepcje fononów na przykładzie łańcucha jednowymiarowego, a następnie przechodzi do wyliczania widma fononowego w krystalicznym argonie poprzez diagonalizację macierzy dynamicznej. Uzyskuje bardzo dobrą zgodność obliczonych relacji dyspersji z danymi eksperymentalnymi. Dodatkowo Autor wyliczył numerycznie wartość ciepła właściwego w funkcji zredukowanej temperatury dla litego układu.

Najważniejsze wyniki badań Autora są przedstawione w następnych dwóch rozdziałach, tj. 4-tym i 5-tym, gdzie najpierw są rozważane procesy rozpraszania elektronów przewodnictwa na fononach, a następnie na domieszkach. Niewątpliwie obydwie mechanizmy rozpraszania są bardzo istotne dla zrozumienia własności transportowych nanostruktur, stąd też podjęta tematyka badawcza jest w pełni uzasadniona. Zanim jednak przejdę do omówienia dalszej części pracy, to chciałbym w tym miejscu zaznaczyć, że przedstawione wyniki zostały uzyskane dzięki zastosowaniu dość wyrafinowanych metod matematycznych, za które należy docenić pracę. Zaletą przedstawionych wyników jest wgląd w strukturę matematyczną problemu, i dzięki czemu stanowią one punkt odniesienia do weryfikacji poprawności obliczeń numerycznych.

Do badania wpływu oddziaływania elektron-fonon na opór właściwy jednoskładnikowych układów metalicznych zastosowano metodę wariacyjną Zimana. W obliczeniach rozpatrywano tylko normalne procesy rozpraszania elektronów na skwantowanych drganiach jonów, uwzględniając liniową relację dyspersji dla fononów i modelując jon za pomocą potencjału Yukawy. W rezultacie uzyskano zależności oporu właściwego od zredukowanej temperatury dla cienkiej warstwy oraz dla układu litego. W zależności od badanego układu (układ lity, cienka warstwa) Autor

zaobserwował różnice w charakterystykach opornościowych dla niskich temperatur. W moim odczuciu dyskusja wyników dla warstw o zadanej grubości wymaga pewnego komentarza, bowiem odwołanie się do uwzględnienia efektów powierzchniowych pochodzących od chropowatości warstwy pozostaje w sprzeczności z przyjętym modelem cienkiej warstwy (nieskończona studnia potencjału). Chciałbym zwrócić uwagę Autora na fakt, iż obniżanie temperatury powoduje redukcję oddziaływania nośników ładunku z fononami, ale jednocześnie przywraca koherencję fazową elektronów przewodnictwa. Oznacza to, że transport elektronowy w cienkiej warstwie zmienia swój charakter z dyfuzyjnego na kwazi-balistyczny. W takim przypadku opór właściwy jest proporcjonalny do odwrotności ilości kanałów transportowych (granica Sharvina dla równania Boltzmanna). W związku z tym ponownie pojawia się pytanie o zakres stosowalności równania Boltzmanna do opisu własności transportowych układów niskowymiarowych, tym bardziej, że Autor sam stwierdza na stronie 27: „*Jednak teoria ta została sformułowana dla materiałów litych, stąd nie daje ona poprawnych wyników dla układów silnie ograniczonych wymiarowo, gdzie średnia droga swobodna elektronu porównywalna jest z rozmiarami próbki.*” Rozważania tego rozdziału kończą się obliczeniami i dyskusją zależności oporu właściwego w funkcji ilości monowarstw. Przedstawione wyniki dowodzą występowania oscylacji oporu właściwego wskutek zmian gęstości elektronów na poziomie Fermiego. Szkoda, że Autor nie analizuje okresu tych oscylacji, jak i ich amplitudy.

Ostatni rozdział pracy jest poświęcony rozpraszaniu elektronów na domieszkach niemagnetycznych. Na wstępie Autor stwierdza, że problem ten jest dobrze znany w fizyce ciała stałego i ma swoją genezę w fizyce jądrowej oraz atomowej. Jednocześnie zwraca uwagę, iż problem ten wciąż nie jest należycie rozwiązany w układach o ograniczonej wymiarowości. Częściowo można zgodzić się z tą opinią, niemniej jednak należy zaznaczyć, że wielu autorów zajmujących się tym zagadnieniem używa do modelowania domieszki potencjału kontaktowego w postaci delty Diraca. To sprawia, że przy odpowiedniej parametryzacji uzyskują oni zadowalające wyniki. W gruncie rzeczy dobór potencjału modelującego domieszkę jest o wiele bardziej złożony, bowiem w nanoukładach ważną rolę odgrywa nie tylko amplituda, ale również zasięg potencjału rozpraszającego.

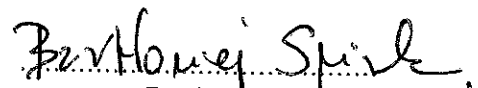
W obliczeniach przedstawionych w tym rozdziale została zastosowana metoda funkcji Greena. Autor wykazał się dużą wiedzą i sprawnością rachunkową przy konstruowaniu funkcji Greena (wzór 5.84). W mojej ocenie jest to najcenniejszy wynik matematyczny pracy ze względu na swoją ogólność i potencjalną możliwość zastosowań do badania dalszych własności fizycznych cienkich warstw. Wyprowadzenie funkcji Greena pozwoliło Autorowi wyznaczyć amplitudę rozpraszania, dla potencjału Yukawy reprezentującego domieszkę, w pierwszym przybliżeniu Borna, a w konsekwencji obliczenie transportowego przekroju czynnego. Co prawda wykonane obliczenia mają charakter pomocniczy, ale stają się one istotnym składnikiem dla modelowania całki zderzeń w zlinearyzowanym równaniu Boltzmanna. Dalsze obliczenia pozwoliły uzyskać wyrażenia na opór właściwy warstwy metalicznej i uśredniony po rozkładzie domieszek transportowy czas relaksacji. Konsekwencją tych obliczeń są wykresy przedstawiające zależność zredukowanego oporu właściwego od ilości monowarstw, przy założeniu, że rozkład domieszek w obrębie warstwy metalicznej jest ciągły albo dyskretny. Szkoda, że Autor nie pokusił się o zbadanie wpływu korelacji położenia domieszek na opór właściwy warstwy poprzez wprowadzenie na odpowiednim etapie swoich rachunków czynników strukturalnych. Zwieńczeniem wyników tego rozdziału jest zgodna z oczekiwaniami zależność uśrednionego oporu właściwego od różnicy wartościowości pierwiastka matrycy i atomu domieszki przy wzrastającej ilości monowarstw.

Podsumowując ocenę merytoryczną pracy chciałbym wyrazić swoje uznanie dla Autora, iż poradził sobie z tak trudną tematyką badawczą i opanowaniem zaawansowanego aparatu matematycznego. Jednakże zmuszony jestem, jako recenzent, podzielić się kilkoma uwagami krytycznymi, które towarzyszyły mi przy czytaniu tej pracy.

1. Autor zastosował bardzo mylący zapis skalarnego elementu całkowania, tzn. został użyty symbol dr , zamiast d^3r . W rezultacie można mieć wątpliwości co jest wielkością skalarną, co jest wielkością wektorową, a co tensorową.
2. Autor konsekwentnie w całej pracy stosuje półklasyczny opis procesów transportowych w cienkich warstwach oparty na równaniu Boltzmann'a, ale nigdzie nie podaje kryteriów stosowalności takiego podejścia oraz konsekwencji wynikających z przyjętego opisu.
3. Autor w dużej mierze zebrał i przedstawił klasyczne już pozycje literaturowe znane od kilkudziesięciu lat i uzupełnił je siedmioma podręcznikami z zakresu fizyki ciała stałego. Natomiast jest bardzo mało odniesień do literatury opublikowanej po roku 2000, dotyczącej stanu badań nad cienkimi warstwami.

Po zapoznaniu się z rozprawą doktorską Pana mgr. inż. Artura Działo, stwierdzam, że cel pracy, czyli teoretyczny opis oddziaływania elektronów z fononami oraz z domieszkami został w pełni osiągnięty, a przedstawione wyniki można uznać za oryginalne. Autor wykazał się dużą wiedzą teoretyczną z zakresu transportu elektronowego w ciałach stałych, jak również matematyki stosowanej. Różnorodność zastosowanych technik rachunkowych do badanych zagadnień świadczy o dużym potencjale Autora i dowodzi to, że nabył On umiejętność prowadzenia badań naukowych. Tym samym przedłożona rozprawa doktorska spełnia wymagania ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, dlatego też wnoszę do Rady Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie o dopuszczenie Pana mgr. inż. Artura Działo do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Kraków 2015-09-14


Bartłomiej J. Spisak