



Mens agitat molem

**Zakład Teorii Fazy Skondensowanej UMCS**  
**Condensed Matter Theory Department**

ul. Radziszewskiego 10  
20 031 Lublin, POLAND

<http://kft.umcs.lublin.pl/ztf> fax: (+48 (0)81) 537 61 90

---

**Prof. dr hab. Karol Izydor Wysokiński** tel.(081)5376236 e.mail: [karol@tytan.umcs.lublin.pl](mailto:karol@tytan.umcs.lublin.pl)

---

Lublin 24 sierpnia 2017 r.

Opinia o pracy doktorskiej p.t.

**Symulacje transportu kwantowego w układach grafenowych ze złączami n-p**  
**pani mgr inż. Aliny Mreńca-Kolasińskiej**

Przedstawiona do recenzji praca doktorska pani **mgr inż. Aliny Mreńca-Kolasińskiej** została napisana pod kierunkiem Pana **prof. dr hab. inż. Bartłomieja Szafrana**. Zgodnie z odpowiednimi przepisami, została ona przygotowana w postaci cyklu opublikowanych prac wykonanych przez Doktorantkę i współpracowników. Prace doktoratu poprzedzone są krótkim autoreferatem zawierającym motywację, cel pracy oraz streszczenie artykułów tworzących rozprawę. Dodano także informacje zawierające pełną listę publikacji Doktorantki, listę grantów, konferencji i odbytych staży naukowych. Okazuje się, że jest Ona bardzo aktywną osobą o znacznym dorobku naukowym: kierowała jednym grantem i była wykonawcą w dwu grantach Promotora, odbyła 3 staże naukowe (staż studencki w Hamburgu, w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN oraz staż w Pizie – ten ostatni związany z prowadzonymi badaniami), prezentowała wyniki badań na 9 konferencjach oraz w PWr, wygłaszając referaty na dwu konferencjach (Szczyrk i Bazylea). Pełna lista publikacji Doktorantki składa się z 11 prac, z których aż 8 opublikowano w Phys. Rev. B.

Pięć spośród prac pani Mreńca-Kolasińskiej wchodzi w skład rozprawy doktorskiej. Jedna z nich została opublikowana w Semiconductor Science and Technology, natomiast pozostałe w Phys. Rev. B. Jest to znakomity dorobek na tym etapie kariery naukowej, w czym z pewnością jest zasługa i Doktorantki, i jej Promotora. Ponieważ wszystkie prace przeszły już proces recenzji będą je omawiał jedynie pod kątem merytorycznym zwracając uwagę na zastosowaną technikę obliczeniową i uzyskane wyniki naukowe. Jeśli chodzi o fragment tekstu poprzedzający publikacje wchodzące do rozprawy i je omawiający to skwituję stwierdzeniem, że mógł być napisany lepiej i być bardziej przydatnym dla czytelnika.

Podstawowe informacje o właściwościach ciał stałych standardowo uzyskujemy z badań transportowych. Pomiar oporu i obliczenie przewodnictwa elektrycznego pozwala często na uzyskanie ważnych informacji o widmie energetycznym badanego układu, oddziaływaniach i mechanizmach rozproszenia nośników. Okazuje się, że to, co łatwo jest zgrabnie stwierdzić i nawet bardzo łatwo zmierzyć zwykle trudno jest poprawnie zinterpretować. Kon-

stacja ta jest jednakowo słuszna w odniesieniu do badań transportowych objętościowych ciał stałych jak i nanostruktur.

W przypadku grafenu badanego w pracy doktorskiej pani mgr Aliny Mreńca-Kolasińskiej sytuacja jest dodatkowo skomplikowana przez liniową – typu Diraca – dyspersję elektronów oraz występowanie tzw. tunelowania Kleina. To, relatywistyczne z natury, zjawisko objawia się idealnym tunelowaniem nośników przez barierę potencjału wyznaczoną w grafenie za pomocą elektrod bramek. Występowanie tunelowania Kleina sprawia, że m. in. pomiary transportowe nie są w stanie stwierdzić istnienia stanów związanych w kropkach kwantowych zdefiniowanych w grafenie przez zewnętrzne potencjały, w przeciwieństwie do analogicznych badań kropek kwantowych w dwuwymiarowym gazie elektronowym np. w heterostrukturach półprzewodnikowych.

Pani mgr Alina Mreńca-Kolasińska, wraz z Promotorem i współautorami analizuje szczegółowo jedną z metod pozwalających na uzyskanie ważnych informacji o lokalizacji stanów w kropkach lub antykropkach w grafenie. Mianowicie bada ona możliwości obrazowania stanów w różnych układach za pomocą mikroskopu sił atomowych. Oryginalnie technika ta była używana do badania lokalnych właściwości gazu elektronowego wytworzonego w głębi heterostruktur półprzewodnikowych i znajdującego się kilkadziesiąt nanometrów pod powierzchnią, zatem niedostępnego technice skaningowego mikroskopu tunelowego.

Cykl prac przedstawiony do oceny stanowi zwartą całość, w której pierwsza praca analizuje możliwość detekcji i obrazowania stanów związanych w grafenowych nanostrukturach z antykropką kwantową. Część wstępna pracy sprowadza się do zdefiniowania geometrii układu, podania Hamiltonianu i metody obliczeniowej. Badane struktury opisywano Hamiltonianem ciasnego wiązania i w sposób numerycznie ścisły rozwiązywano problem Poissona-Schroedingera. Autorzy analizują wpływ zaburzenia wywołanego obecnością igły mikroskopu sił atomowych w pobliżu powierzchni grafenu na rozkład ładunku i pojawienie się prądów w próbce. Przewodność elektryczną liczy się metodą Landauera w zerowej temperaturze. W praktyce sprowadza się to do określenia współczynnika transmisji układu. Istotnym problemem technicznym jest numeryczne znalezienie funkcji i energii własnych układu o zadanej geometrii połączonego z zewnętrznymi, też grafenowymi elektrodami, które doprowadzają i odprowadzają prąd.

Rozwiązanie problemu wymaga precyzyjnej analizy brzegów próbki grafenowej i ułożenia atomów brzegowych. Struktura krystalograficzna grafenu pozwala na dwa sposoby ułożenia atomów węgla na brzegu paska wyciętego z płaszczyzny. Jeden ze sposobów ułożenia atomów na brzegu próbki tradycyjnie nazywany jest „typu zygzak” a drugi „typu fotelowego” (armchair – to określenie w j. angielskim). Ponieważ niezależnie od szerokości nieskończenie długiego paska grafenowego tworzącego elektrody doprowadzające prąd widmo niskoenergetyczne jest liniowe (typu Diraca), więc dla każdego wektora falowego istnieją stany biegnące w „lewo” i w „prawo”. Analiza układu wymaga precyzyjnego rozważenia tych stanów oraz rezonansów w strukturze centralnej. Jak pokazano w pracy I rozprawy położenie rezonansów i ich amplituda zależą od położenia i „głębokości” potencjału antykropki. Pomiar eksperymentalny rezonansów wprowadza dodatkowe zaburzenia w układzie związane z naładowaną igłą mikroskopu sił atomowych. Igła ta w doktoracie nazywana jest bramką skanującą, a zaburzenie modelowane jest potencjałem o charakterze funkcji Lorentza zależnym od odległości igły od powierzchni.

*Jeśli dobrze rozumiem, możliwość takiego modelowania potencjału wcześniej badana przez Promotora rozprawy dla dwuwymiarowego gazu elektronowego w heterostrukturach półprzewodnikowych i została zastosowana do grafenu bez dalszej analizy. Ciekaw jestem, jakie argumenty przemawiają za stosowalnością takiego modelowania do gazu w grafenie i jakie są jego ograniczenia. Pytania te wynikają choćby stąd, że w grafenie występuje tunelowanie Kleina, a w gazie o innej dyspersji brak tego zjawiska i obecność barier potencjału zawsze lokalizuje stany w tym drugim przypadku.*

Jednym z ciekawych wyników omawianej pracy jest analiza stanów zlokalizowanych w otoczeniu antykropki i prądów z nimi związanych oraz przesunięć położenia oraz zmian szerokości rezonansów.

Stosując podobne podejście i nieco inną technikę obliczeniową w kolejnej, drugiej pracy rozprawy opublikowanej w *Semiconductor Physics and Technology* analizowano przewodnictwo dwu rodzajów grafenowych wstążek o różnych kształtach i kwantowego punktu kontaktowego w obecności bramki skanującej. Jedną ze wstążek to pasek grafenu o stałej szerokości, a druga to dwie wstążki o różnej szerokości i gładkim połączeniu pomiędzy nimi w kształcie trapezu. Kwantowy kontakt lub kwantowy punkt kontaktowy (ang. QPC od quantum point contact) to przewężenie w szerokim pasku grafenowym.

Jak wiadomo i na co wskazywano w pracy szereg właściwości układu zależy od tego, czy wstążki grafenowe mają brzegi typu zygzak, czy armchair, a w tym drugim przypadku czy ich widmo ma charakter metaliczny, czy półprzewodnikowy. Nie będę opisywał szczegółowych wyników tej pracy, gdyż to wymaga ilustracji w postaci rysunków. W omawianej pracy zamieszczono 128 pojedynczych rysunków pogrupowanych w 20 paneli z podpisami. Opis zamieszczony w pracy zawiera dokładną analizę obserwowanych zachowań.

Moją uwagę przykuła obserwacja Autorki rozproszenia międzyciolkowego prowadzącego do zjawisk interferencji i przewodnictwa elektrycznego szybko zmieniającego się w funkcji położenia bramki skanującej dla małych wartości energii Fermiego. Dla dużych wartości energii Fermiego ( $E_F \approx 200-326$  meV), gdy kilka podpasem przecina poziom Fermiego przewodnictwo zmienia się prawie harmonicznie w funkcji położenia bramki w poprzek nanostruktury, z minimum w środku układu. Co ciekawe, w tym ostatnim przypadku zależność jest podobna dla różnych ułożeń atomów brzegowych, choć występuje dla nieco różnych energii.

Możliwość skonstruowania interferometru typu Aharonova – Bohma w grafenie w obecności silnego prostopadłego pola magnetycznego jest tematem III pracy rozprawy (*Phys. Rev. B* **93** 125411 (2016)), wykonanej podczas pobytu Doktorantki w Pizie (Włochy). Tu autorzy wykorzystują fakt, że potencjał igły mikroskopu sił atomowych definiuje w grafenie złącze n-p, gdyż dodatni potencjał w pobliżu igły efektywnie prowadzi do pojawienia się obszaru o przewodnictwie dziurowym w grafenie, który z dala od bramki charakteryzuje się przewodnictwem elektronowym. Sprzężenie stanów złącza ze stanami brzegowymi paska grafenu w silnym polu magnetycznym jest odpowiedzialne za wyraźnie widoczne zjawisko interferencji. W pracy porównano też, zależne od pola magnetycznego, rezonansowe częstotliwości oczekiwane teoretycznie na podstawie prostego modelu i uzyskane z obliczeń. Wyniki pozostają w bardzo dobrej zgodności. Występowanie wyższych harmonik zależy od warunków na brzegu struktury grafenowej. Pojawiają się one tylko dla próbek z półprzewodzącą przerwą w otoczeniu poziomu Fermiego ( $E_F=0$ ).

Kontynuacją poprzedniej pracy jest publikacja z Phys. Rev. B **94**, 195315 (2016), w której jedynym współautorem jest Promotor. Pani Mreńca-Kolasińska analizuje w niej wpływ pola magnetycznego na stany w pierścieniu z zewnętrznymi elektrodami wyciętym w grafenie oraz w podobnym interferometrze ale wytworzonym w dużym prostokącie przez dodatni potencjał igły mikroskopu sił atomowych. Stany kolistej struktury grafenowej pod igłą mikroskopu AFM mają charakter dziuowy, a w pozostałej części prostokąta elektronowy. Użyto metody obliczeniowej nieco różnej od stosowanej poprzednio oraz dodatkowo analizowano wpływ domieszek (w postaci brakujących atomów węgla w strukturze). Rozważono także skończone wartości temperatury i przypadek nieliniowego transportu (skończone napięcia pomiędzy elektrodami).

Okazuje się, że zarówno temperatura jak i skończone napięcia pomiędzy elektrodami istotnie zmniejszają amplitudę oscylacji przewodnictwa w funkcji pola magnetycznego i zanik wyższych harmonicznych.

*W kontekście wyników dotyczących silnie nieliniowego transportu nie jest dla mnie jasne, czy w obliczeniach została uwzględniona zmiana potencjału elektrostatycznego próbki. Jeśli tak, to, w jaki sposób uwzględniono tę zmianę, a jeśli nie, to, jakiego wpływu należałoby oczekiwać? Te pytania są ważne dla teorii uwzględniającej oddziaływanie elektronów ze sobą (tu pomijane). Chętnie posłucham komentarzy Doktorantki na ten temat w trakcie publicznej obrony.*

Zwieńczeniem badań pani mgr Aliny Mreńca-Kolasińskiej jest jej współautorstwo w pracy eksperymentalnej. Doświadczalnicy z Pizy przy wsparciu Doktorantki i współpracowników z AGH i Pizy mierzą oraz objaśniają teoretycznie zjawiska magnetotransportu w warunkach kwantowego zjawiska Halla w grafenie. W tym doświadczeniu 4 pary elektrod wytworzono na utlenionym krzemie typu  $p^+$  oraz przykryto izolującą warstwą PMMA (150nm), na której umieszczono platek grafenowy.

Geometria układu oraz potencjały na elektrodach pomiarowych poniżej warstwy grafenowej oznaczane  $V_{SG}$  (od split gate) oraz potencjał  $V_{BG}$  (od back gate) na elektrodzie krzemowej poniżej warstwy  $SiO_2$  o grubości 300 nm sprawia, że układ staje się niejednorodny z fragmentami o różnych wartościach współczynników wypełnienia pasma  $v$ . Autorzy sugerują podział układu na obszary o trzech różnych wartościach tych współczynników  $V_{SG}$ ,  $V_{BG}$  i  $V_{QPC}$ . Dwa pierwsze pojawiają się niezależnie od siebie i mogą być niezależnie zmieniane jedną z elektrod. Trzeci współczynnik wypełnienia  $v_{QPC}$  charakteryzuje obszar centralny grafenu, w którym wszystkie elektrody wpływają na jego wartość.

Wyniki uzyskane dla omówionej geometrii odbiegają od pomiarów wcześniejszych za pomocą bramki skanującej nad strukturą grafenową. Należy zgodzić się z autorami pracy, że różnice związane są z geometrią badanej struktury a w szczególności z liczbą i ułożeniem bramek pomiarowych.

Założenie o trzech niezależnych współczynnikach wypełnienia oraz uwzględnienie w teorii Buttikera – Landauera możliwych stanów krawędziowych prowadzi do dobrego jakościowego i (chyba) ilościowego opisu wyników doświadczalnych. Na tym autorzy nie poprzestają i w drugiej części pracy Doktorantka wraz ze współpracownikami z AGH modeluje i oblicza przewodnictwa elektryczne oraz diagonalną wartość oporu elektrycznego badanej próbki. Zastosowany model i techniki obliczeniowe są podobne do tych z wcześniejszych prac grupy prof. Szafrana. Polegają one na samo zgodnym rozwiązaniu problemu Schroedin-

gera – Poissona dla realistycznej geometrii mierzonej struktury grafenowej – ze względów praktycznych przeskalowanej o czynnik 4.

Okazało się jednak, że transport w badanym doświadczalnie układzie nie jest balistyczny i przy takowym założeniu uzyskano zupełnie inne wyniki. Dopiero wprowadzenie do opisu zjawisk defazowania dało poprawny opis. Zjawiska niszczące balistyczny charakter transportu i defazowanie standardowo uzyskuje się wprowadzając dodatkowe elektrody potencjałowe (tzn. takie do których elektrony mogą tunelować, zapominając o fazie funkcji falowej, ale nie płynie w nich prąd). Po uwzględnieniu zjawisk defazowania uzyskano dobry opis zjawiska transportu w badanej strukturze jakościowo zgodny z modelem fenomenologicznym bazującym na schematycznym opisie Buttikera – Landauera. Przeprowadzone obliczenia uzasadniają stosowany wcześniej model z trzema wartościami współczynników wypełnienia pasma.

*W kontekście braku ilościowej zgodności dla paru wartości potencjałów bramek rodzi się pytanie o źródło tych niezgodności. Pewnie można podać wiele wyjaśnień włącznie z pominiętymi w opisie teoretycznym oddziaływaniami nośników, ale chciałbym usłyszeć wyjaśnienia i argumenty Doktorantki. Chciałbym też dowiedzieć się o możliwość obliczenia składowej Halla oporu elektrycznego dla różnych wartości pola i uzyskanie opisu jego przebiegu i pojawienia się plateau.*

**Reasumując stwierdzam, że Pani mgr inż. Alina Mreńca – Kolasińska wykonała tytaniczną pracę obliczeniową, napisała programy komputerowe, wykonała obliczenia i mnóstwo znakomitych rysunków obrazujących uzyskane wyniki oraz przeprowadziła dogłębną analizę zjawisk zachodzących w grafenie w obecności bramki skanującej. Prace wchodzące w skład rozprawy zostały opublikowane w bardzo dobrych czasopismach specjalistycznych. Obliczenia numeryczne i później ich analiza wymagały precyzyjnego określenia ułożenia brzegowych atomów węgla w strukturach grafenowych. Rozprawa doktorska z nadmiarem spełnia wszystkie ustawowe i zwyczajowe wymagania i wnioskuję o dopuszczenie Autorki do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

Jednocześnie zastrzegam sobie prawo wystąpienia o wyróżnienie rozprawy po wysłuchaniu publicznej obrony, która jest istotnym elementem całego przewodu doktorskiego.