

Recenzja pracy doktorskiej Pana mgr. Dominika Suszalskiego
pt. „*Relativistic charge and energy transport phenomena in graphene*
***nanostructures*”**

Rozprawa doktorska Pana mgr. Dominika Suszalskiego dotyczy własności – głównie transportowych - grafenu, włącznie z budzącą ostatnio duże emocje dwuwarstwą grafenową. Jest to tematyka wciąż bardzo aktualna, choć wydaje się, że oczekiwania odnośnie praktycznego zastosowania, rozbudzone po pierwszych udanych próbach wytworzenia płatków grafenu, nieco zmaląły. Wynika to z faktu, że grafen okazał się materiałem trudniejszym w wytwarzaniu i praktycznych zastosowaniach, niż to wcześniej przypuszczano. Ale właśnie dlatego badania w tym obszarze są ważne dla pokonania napotkanych trudności.

Rozprawę doktorską stanowi cykl prac, które zostały opublikowane w czasopismach naukowych, co jest jedną z możliwości oferowanych przez ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym. Składają się na nią następujące publikacje:

1. Dominik Suszalski, Grzegorz Rut, Adam Rycerz, *Lifshitz transition and thermoelectric properties of bilayer graphene*, Phys. Rev. B **97**, 125403 (2018),
2. Dominik Suszalski, Grzegorz Rut, Adam Rycerz, *Thermoelectric properties of gapped bilayer graphene*, J. Phys.: Condens. Matter **31**, 415501 (2019),
3. Dominik Suszalski, Grzegorz Rut, Adam Rycerz, *Mesoscopic valley filter in graphene Corbino disk containing a p-n junction*, J. Phys. Mater. **3**, 015006 (2020),
4. Dominik Suszalski, Grzegorz Rut, Adam Rycerz, *Conductivity scaling and the effects of symmetry-breaking terms in bilayer graphene Hamiltonian*, Phys. Rev. B **101**, 125425 (2020),
5. Adam Rycerz, Dominik Suszalski, *Graphene disk in a solenoid magnetic potential:*

Aharonov-Bohm effect without a two-slit-like setup, Phys. Rev. B **101**, 245429 (2020),

6. Dominik Suszalski, Adam Rycerz, *Adiabatic quantum pumping in buckled graphene nanoribbon driven by a kink*, arXiv:2002.08507v1 (zaakceptowania w Acta Physica Polonica B).

Ostatnia publikacja w rozprawie figuruje jako nieopublikowana, ale w momencie przygotowywania niniejszej recenzji jest już opublikowana w Physical Review B:

7. Dominik Suszalski, Adam Rycerz, *Adiabatic pumping driven by moving kink and quantum standard ampere in buckled graphene nanoribbon*, Phys. Rev. B **102**, 165408 (2020).

Jak widać z powyższego zestawienia, wszystkie prace napisane są we współpracy z promotorem, prof. Adamem Rycerzem, a ponad połowa także z promotorem pomocniczym, dr. Grzegorzem Rutek. Jedynie w jednej z tych publikacji doktorant nie jest pierwszym autorem, a przedstawione oświadczenia współautorów świadczą o jego kluczowej roli przy powstawaniu tych prac. Wymagana ustawą spójność tematyczna jest widoczna już po analizie tytułów publikacji. Dodatkowo, ich zbiór opatrzony jest pięćdziestostronicowym komentarzem, wskazującym na wzajemne powiązania pomiędzy poszczególnymi publikacjami. Wszystkie one dotyczą zjawisk transportowych w grafenie i jego dwuwarstwie. W komentarzu doktorant wyróżnia w zbiorze publikacji część, która dotyczy własności samego materiału, tj. grafenu i jego dwuwarstwy i obejmuje prace [1], [2] i [4] oraz drugą, która dotyczy własności układów wykonanych z grafenu. Druga część obejmuje pozostałe publikacje [3], [5], [6] i [7]. Pewną wadą załączonego komentarza jest brak bezpośrednich odwołań do poszczególnych publikacji stanowiących dorobek. Oczywiście czytając komentarz i sprawdzając występujące w nim referencje można dojść do tego, która praca jest omawiana w którym miejscu, ale nie jest to typowy „przewodnik”, co nieco utrudnia zadanie recenzentowi. Dodatkową komplikacją jest fakt, że w wykazie publikacji prace uporządkowane są chronologicznie, a przy ich omawianiu są one zgrupowane tematycznie. Jest to oczywiście uzasadnione i nie stanowiłoby problemu, gdyby tylko w komentarzu doktorant powoływał się na prace z wykazu publikacji, a nie z całej bibliografii umieszczonej na końcu komentarza.

Pierwszą część rozprawy rozpoczyna publikacja [1], w której analizowana jest dwuwarstwa grafenowa, w szczególności wpływ drugiej całki przeskoku międzypłaszczyznowego (t' lub γ_3) na własności termoelektryczne. Uwzględnienie tych przeskoków prowadzi do zmiany topologii powierzchni Fermiego (przejście Lifshitz'a), z którą często wiąże się pojawienie się osobliwości van Hove'a. Tak jest i w tym przypadku. Wpływ tego efektu na transport elektryczny jest dość dobrze zbadany, natomiast praca doktoranta koncentruje się na własnościach termoelektrycznych, znajdując ciekawe konsekwencje. W szczególności interesujące jest pojawienie się drugiego maksimum termosiły w funkcji koncentracji nośników (a dokładniej w funkcji potencjału chemicznego), które powinno być widoczne w pewnym zakresie temperatur. Sam efekt jest ciekawy, ale chciałbym tu spytać, czy łamię on formułę Mott'a, czy też może być zrozumiany w jej ramach? Druga kwestia, o którą chciałbym spytać związana jest z aspektem eksperymentalnym: czy w realnym układzie o geometrii typowej dla eksperymentów transportowych na grafenie należy się spodziewać oscylacji Fabry-Pérot'a, które mogłyby „zagłuszyć” to drugie maksimum w niskich temperaturach, czy one są jedynie efektem korzystania z wyidealizowanego modelu? Ostatnia sprawa, którą chciałbym poruszyć w kontekście pracy [1], to kwestia ogólności otrzymanych anomalii. Otóż stwierdzenie znajdujące się w komentarzu, a mówiące, że „*trigonal warping*” jest popularną nazwą tunelowania γ_3 , jest nie do końca prawdziwe, ponieważ ten efekt występuje także np. w monowarstwie grafenu w obecności sprzężenia spinowo-orbitalnego typu Rashby [np. PRB **82**, 113 (2010) czy PRB **97**, 085416 (2018)]. Czy w takim przypadku również można by się spodziewać zademonstrowanych w pracy [1] własności termoelektrycznych?

O ile w pracy [1] badany był system z widmem bezszczelinowym, to druga z prac pierwszej części rozprawy (praca [2]) uwzględnia obecność szczeliny. Jest to o tyle istotne, że dwuwarstwa grafenowa jest chyba jedynym półprzewodnikiem, w którym szczelinę można łatwo otworzyć i kontrolować poprzez przyłożenie prostopadłego pola elektrycznego, co wskazuje na potencjalne znaczenie takiego układu do elektroniki opartej na węglu. W pracy [2] badane jest jak własności termoelektryczne zależą od wielkości szczeliny. W szczególności przy użyciu podejścia Landauera-Bütlickera wyliczone zostały poprawki do wyznaczonej przez Goldsmida i Sharpa wartości współczynnika Seebacka. Pokazano, że są one pomijalne jedynie dla szczelin nie większych niż $k_B T$. W pracy wyznaczona także została wartość potencjału chemicznego przy którym termosiła osiąga maksimum oraz zbadano wpływ *trigonal warping*. Wyniki częściowo uzyskane zostały przy użyciu

rodziny modeli danych równaniem (13). Choć w „*Supplementary Information*” znajduje się krótkie uzasadnienie zaproponowanej formy transmitancji, to nie do końca jest oczywiste w jaki sposób dobierana jest wartość α , a dokładniej jaka jest jej interpretacja fizyczna, tzn. czy jest to parametr czysto fenomenologiczny, czy można jakoś uzasadnić konkretne wartości? Innym ciekawym problem jej kwestia, czy zastosowany podział próbki na mniejsze fragmenty i dopasowanie funkcji falowych na ich złączeniach jest podejściem zupełnie ogólnym, czy wprowadza jakieś przybliżenia, np. wymuszając pewną formę rozwiązań. Jest to pytanie o tyle ciekawe, że podobne problemy, w których występują równocześnie wielkości różniące się o wiele rzędów często pojawiają się w zagadnieniach transportu, zwłaszcza przy obliczeniach z wykorzystaniem macierzy rozpraszania.

W odróżnieniu od dwóch poprzednich prac, w których doktorant koncentrował się głównie na własnościach termoelektrycznych, praca [4] dotyczy transportu elektrycznego dwuwarstwy grafenowej. Doktorant bada tu wpływ poszczególnych efektów (poprzez wprowadzanie do hamiltonianu odpowiadających im wyrazów) na przewodnictwo przy zmianach długości próbki. W szczególności w pracy [4] wcześniejsze badania balistycznego transportu w dwuwarstwie uzupełnione zostały obliczeniami uwzględniającymi tunelowanie γ_4 , przy czym wpływ ten okazał się zależny od wartości pozostałych parametrów. Między innymi pokazano, że przy niezerowej wartości γ_4 przewodnictwo może w granicy rosnącej długości próbki być rozbieżne dla $\gamma_3 \neq 0$ (czyli w obecności *trigonal warping*) lub zniknąć gdy $\gamma_3 = 0$. Prócz międzyplaszczynowych przeskoków badany był także wpływ potencjału naprzemiennego δ_{AB} , otwierającego szczelinę w widmie energetycznym. Obecność poszczególnych wyrazów wiąże się z łamaniem symetrii hamiltonianu takich jak niezmiennosc względem obrotów, symetria cząstka-dziura czy równoważność podsieci grafenowych. Oprócz przewodnictwa, badany był także wpływ tych parametrów na czynnik Fano. Obliczenia prowadzone były, podobnie jak w przypadku pozostałych prac doktoranta, z wykorzystaniem formalizmu Landauera-Büttickera. Ciekawa jest krótka dyskusja możliwości spontanicznego łamania symetrii z wykorzystaniem przewodnictwa jako parametru porządku.

Drugą część dorobku publikacyjnego doktoranta załączony komentarz rozpoczyna od omówienia publikacji [5]. Jest to krótka praca, w której zaprezentowane jest numeryczne rozwiązanie problemu transportu w dysku Corbino wykonanym z grafenu, w obecności

strumienia pola magnetycznego przechodzącego przez środkowy otwór. Otrzymane wyniki są rozwinięciem wyników opublikowanych dziesięć lat wcześniej przez promotora, gdzie podobny dysk znajdował się w jednorodnym polu magnetycznym. Okazuje się, że podobnie jak w przypadku niezerowego pola magnetycznego, sam potencjał wektorowy może także prowadzić do oscylacji przewodnictwa, co jest analogiem efektu Aharonova-Bohma. W pracy przeprowadzono także analizę wpływu pola elektrostatycznego łamiącego cylindryczną symetrię układu.

Kolejna praca, do której odwołuje się komentarz, na liście publikacji figuruje jako [3]. Zawiera ona propozycję użycia grafenowego dysku Corbino do budowy filtra dolinowego, tj. urządzenia, którego przewodnictwo będzie różne dla dolin K oraz K' . Urządzenia takie jest niezbędne dla prób realizacji elektroniki opartej o dolinowy stopień swobody, czyli tzw. *valleytronics*. Przy użyciu numerycznego podejścia opartego o *transfer-matrix* w pracy pokazano, że wprowadzenie do hamiltonianu potencjału elektrostatycznego oraz wyrazu masowego może przy odpowiednio silnym polu magnetycznym prowadzić do pojawienia się prądów spolaryzowanych dolinowo. Prądy te są prądami krawędziowymi płynącymi wzdłuż granicy obszarów typu n i p . Wprowadzone do hamiltonianu wyrazy łamią symetrie prowadząc do nierównoważności dolin K i K' , czym umożliwiają dolinową polaryzację tych prądów. Zaletą proponowanego rozwiązania jest sugerowana nieczułość skuteczności filtra na szczegóły układu na poziomie atomowym. Układ wydaje się ciekawy, choć możliwość jego praktycznej realizacji (i sterowania) nie jest oczywista. Ale właśnie w związku z tą kwestią chciałbym spytać o rolę geometrii Corbino, czy jest ona tu kluczowa dla działania filtra, czy jej wybór podyktowany był możliwością przeprowadzenia obliczeń? Natomiast drugie pytanie dotyczy wyrazu masowego: czy ten sam efekt można by uzyskać budując układ w taki sposób, że bezmasowa połowa będzie z grafenu, a druga część z dwuwarstwy grafenowej?

Dwie ostatnie prace w dorobku doktoranta, [6] oraz [7], dotyczą bardzo ciekawego pomysłu wykorzystania paska grafenowego jako pompy elektronowej. Idea opiera się na wykorzystaniu możliwości realizacji modelu ϕ^4 w takim układzie, gdzie defekt topologiczny (*kink*) może być przesuwany wzdłuż paska poprzez wprowadzenie atomów w drgania. Obliczenia wykonane w tych pracach pokazują, że w przypadku izolacyjnego paska defekt taki może tworzyć stan związany w *kinku*, natomiast w pasku przewodzącym defekt może tworzyć tam obszar izolacyjny. W obu przypadkach przesuwanie defektu może skutkować

transportem ładunku. Autorzy użyli modelu Su-Schrieffera-Heegera, którego parametry wyliczane były metodą dynamiki molekularnej z wykorzystaniem pakietu LAMMPS. Pomysł wydaje się ciekawy, choć pewnie warto byłoby porównać otrzymane wyniki, zwłaszcza efektywność „pompowania” ładunku, z innymi propozycjami pomp grafenowych. Chciałbym też wyjaśnić problem stosowalności użytego podejścia. Autorzy argumentują, że adiabatyczny charakter pompy wynika z wyliczonej prędkości poruszania się *kinku*, która jest znacznie mniejsza niż prędkość Fermiego. Trzeba natomiast zwrócić uwagę, że *kink* jest „napędzany” wymuszonymi drganiami atomów. Czy w tej sytuacji do opisu układu nie trzeba by użyć formalizmu Floquet’a? Ponadto, wiadomo, że „wybrzuszenia” grafenu mogą prowadzić do gigantycznych wartości „sztucznego pola magnetycznego”. Czy deformacja grafenu w postaci *kinku* nie będzie więc generowała efektów orbitalnych, które mogłyby zmienić widmo energetyczne i charakter zlokalizowanych tam stanów?

Przechodząc do ogólniejszego spojrzenia na rozprawę Pana mgr. Dominika Suszalskiego stwierdzam, że mimo zgrupowania publikacji w dwa oddzielne obszary (własności grafenu oraz układy te własności wykorzystujące), publikacje w sposób oczywisty spełniają ustawowy wymóg tworzenia *„spójnego tematycznie zbioru artykułów opublikowanych lub przyjętych do druku w czasopismach naukowych (...)”*. Artykuły te zostały opublikowane w czasopismach, które nie tylko znajdują się na liście czasopism *„określonych przez ministra właściwego do spraw nauki na podstawie przepisów dotyczących finansowania nauki”*, ale przede wszystkim cieszą się dużą i bardzo dużą renomą w środowisku fizyków pracujących w obszarach będących tematyką rozprawy.

Ponieważ rozprawę stanowi cykl artykułów, uzupełniający je przewodnik nie podlega ocenie. Jego rolą powinno być poprowadzenie czytelnika przez prace stanowiące rozprawę. Niestety, roli tej nie spełnia należycie ze względu na wspomniany już brak jednoznacznych odwołań do prezentowanych publikacji oraz z powodu niezbyt starannej edycji, która przejawia się licznymi błędami w tekście (np. nie wiadomo czy *„wide semi-conductors”* na str. 27 miało oznaczać *„wide gap semiconductors”* czy *„wide band semiconductors”*). Innym przykładem braku należytej staranności może być zupełny brak opisu osi (ani na wykresie, ani w podpisie) rysunku 19 na str. 46.

Oczywiście uwagi te nie wpływają na ogólną ocenę rozprawy, która jest ze wszech miar pozytywna. Dorobek publikacyjny wskazuje, że doktorant bardzo dobrze opanował

zarówno podstawy teoretyczne fizyki grafenu, jak i potrafi swobodnie posługiwać się używanymi w tym obszarze metodami obliczeniowymi. W związku z powyższym stwierdzam, że rozprawa w pełni spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim w *Ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym*, jednocześnie wnosząc o dopuszczenie Pana mgr. Dominika Suszalskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Maciej Maśka