

*Prof. dr hab. E. Zipper*  
*Instytut Fizyki*  
*Uniwersytet Śląski*

**Recenzja pracy doktorskiej**  
**Pana mgra Dariusza Żebrowskiego:**  
**„Elektrostatyczne kropki kwantowe**  
**w strukturach grafenowych”**

W nanofizyce oprócz doskonalenia własności już istniejących materiałów odkrywa się też nowe materiały o niezwykłych, wręcz unikatowych właściwościach. Takim materiałem jest grafen nazywany cudownym ze względu na swoje fizyczne i elektroniczne własności. Przewodzi prąd 200 razy szybciej niż krzem, jest najlepszym znanym przewodnikiem ciepła, jest przezroczysty i 50 razy wytrzymalszy od stali. Istnieje więc ogromna potrzeba zbadania grafenowych struktur i porównania ich z układami półprzewodnikowymi już dobrze przetestowanymi.

W przedstawionej mi do recenzji pracy doktorskiej badane są własności kropek kwantowych utworzonych w strukturach grafenowych przez elektrostatyczny potencjał uwięzienia.

Grafenowe kropki kwantowe są atrakcyjnymi kandydatami do zastosowania ich m.in. do zapisu i przetwarzania kwantowej informacji. W szczególności spiny zlokalizowanych elektronów w układach na bazie grafenu mogą mieć zastosowanie jako nośniki informacji w spintronice z powodu słabego oddziaływania nadsubtelnego co przekłada się na stosunkowo długie czasy koherencji spinowej.

Praca składa się z czterech prac naukowych, opublikowanych w bardzo dobrych czasopismach naukowych (3 prace w *Physical Review*, 1 w *Semiconductor Science and Technology*) uzupełnionych streszczeniem, opisem metody obliczeniowej i podsumowaniem. We wszystkich tych pracach doktorant jest pierwszym autorem.

Jednowarstwowy grafen będący granicznym przypadkiem cienkiej warstwy grafitu został zbadany teoretycznie już kilkadziesiąt lat temu i wiele prac

kwestionowało możliwość uzyskania takiej warstwy eksperymentalnie. Dopiero 23 lata temu Andre Geim i Kostya Novoselov uzyskali stabilne monowarstwy co rozpoczęło olbrzymie zainteresowanie materiałami na bazie grafenu ze względu na ich niezwykle własności, które mogą mieć ważne zastosowania w technologiach przyszłości powstających w oparciu o prawa mechaniki kwantowej.

W monowarstwie relacja dyspersyjna czystego grafenu jest liniowa i nie posiada przerwy energetycznej - uniemożliwia to tworzenie elektrostatycznych kropek kwantowych. Kropki takie mogą być otrzymane w grafenie dwuwarstwowym. Analizując grafen dwuwarstwowo rozpatrzono tzw. konfigurację Bernala w której warstwy przesunięte są o stały wektor. W takim układzie oddziaływania van der Waalsa wyróżniają podsieci na warstwach. Powoduje to, że relacja dyspersyjna w pobliżu punktów K i K' staje się zależnością kwadratową i można wytworzyć zewnętrznym, niejednorodnym polem elektrycznym kropki kwantowe których własności są przedmiotem badań w tej pracy doktorskiej. Obliczenia wykonane zostały atomistyczną metodą ciasnego wiązania, która pozwala na dobry opis efektów mieszania międzydolinowego przez krawędzie oraz oddziaływania między elektronami.

Poniżej omówię krótko niektóre zagadnienia wchodzące w skład rozprawy.

W pracy 1 : „*Confined states in quantum dots defined within finite flakes of bilayer graphene: Coupling to the edge, ionization threshold and valley degeneracy*” zbadano stany w kropce kwantowej(QD) utworzonej przez elektrostatyczny potencjał tworzący w płatku z grafenu dwuwarstwego o skończonych rozmiarach. Wykazano istnienie stabilnych stanów zlokalizowanych w QD oraz rozważono wpływ na te stany oddziaływania z krawędziami płatków typu zig-zag i armchair. Dla tych ostatnich pokazano, że istnieje skończona energia jonizacji kropki (podobnie jak w kropkach z materiałów półprzewodnikowych). Jest to ważne, gdyż wiele nanourządzeń jest zbudowanych z wykorzystaniem tej własności (np.jednoelektronowe tranzystory czy prostowniki do zasilania których potrzeba mało energii). Nasuwa się tu pytanie czy łatwo jest uzyskać płatki ze ściśle określonym typem krawędzi.

W pracy 2: „*Charging graphene nanoribbon quantum dots*” przedstawiono symulację ładowania QD utworzonej w nanowstędze przez zewnętrzny potencjał. Przy pomocy modelu używającego podejścia ciasnego wiązania dla spektrum jednoelektronowego i teorii funkcjonału gęstości dla przybliżonego opisanie oddziaływania między elektronami zbadano QDs typu n- i p- w zależności od znaku potencjału. Przedyskutowano przerwę transportową i rozkład ładunku w układzie z liczbą dodatkowych ładunków w przedziale

$N=(-24,24)$ . Przedstawiono diagram stabilności potencjału chemicznego z przerwą transportową w funkcji potencjałów elektrod - uzyskany diagram pozostaje w jakościowej zgodności z badaniami eksperymentalnymi, co jest dużą zaletą tej pracy i potwierdza słuszność przyjętych przybliżeń. Przedyskutowano również przybliżenie zamrożonego pasma walencyjnego do opisu ładowania QDs jedynie przez elektrony i porównano wyniki tego przybliżenia z dokładnymi obliczeniami.

Głównym celem pracy 3 : „ *Spin transitions driven by electric dipole spin resonance in fluorinated single- and bilayer-graphene quantum dots* ” było zbadanie elektrycznego dipolowego rezonansu magnetycznego z obrotem spinu . Manipulowanie spinami przy pomocy pola elektrycznego umożliwia oddziaływanie spin-orbita indukowane tu lokalnie przez np. nieliczne adsorbowane atomy fluoru (w czystym grafenie oddziaływanie spin-orbita jest bardzo małe). Dynamikę systemu opisano stosując jako bazę stany stacjonarne wyliczone metodą ciasnego wiązania, zakładając że struktura pasmowa grafenu pozostaje niezaburzona . W pracy wykazano, że dla tak przygotowanego układu czasy obrotu spinu aktywowane przez okresowo zmienne pole elektryczne są krótsze niż czasy relaksacji spinowej co powinno pozwolić na doświadczalny pomiar tych przejść spinowych. Zastanawiam się czy kilkakrotnie krótsze czasy obrotu spinu rzeczywiście wystarczą do detekcji tego zjawiska?

W pracy 4: “ *Double quantum dots in bilayer graphene* “ zbadano ciekawy przypadek tzw. sztucznych molekuł uformowanych w układzie dwóch „elektrostatycznych“ QDs w dwuwarstwowym grafenie. Takie układy są obecnie intensywnie badane w kontekście przetwarzania kwantowej informacji gdzie dodatkowy stopień swobody związany ze sprzężeniem kropek jest istotny- założono bowiem, że elektrony mogą tunelować między kropkami. Przedstawiono rozciągnięte orbitale molekularne w podwójnych kropkach i pokazano ich wiążąco-antywiązący charakter, przeciwny dla obu podsieci. Funkcje falowe obliczone w przybliżeniu atomistycznego ciasnego wiązania zostały następnie użyte w metodzie oddziaływania konfiguracji. To podejście uwzględnia rozproszenia indukowane przez krótkozasięgowe oddziaływanie Coulomba. Obliczono i zinterpretowano jedno- i dwuelektronowe spektra energii. Przedyskutowano szczegółowo skomplikowane spektra dla jednego elektronu , m.in. zbadano spektrum energii w funkcji odległości między QD's. Dla dwóch elektronów pokazano m.in. tworzenie się stanów z symetryczną lub antysymetryczną przestrzenną funkcją falową rozszczepionych przez oddziaływanie wymiany. Przedyskutowano też przestrzenne , spinowe i orbitalne symetrie stanów dwuelektronowych.

W krótkim podsumowaniu, które autor zamieścił w streszczeniu podsumowano cztery prace wchodzące w skład dysertacji. Brak mi tu jednak

trochę ogólnej dyskusji otrzymanych wyników w szerszym kontekście pracy jako całości. Ciekawe byłoby też szersze porównanie półprzewodnikowych QDs z tymi uformowanymi na grafenie z podkreśleniem zalet tych ostatnich. Przydałyby się też rozważania jak te prace mogą zostać wykorzystane do projektowania i budowy nanourządzeń elektronicznych i spinotronicznych.

Praca jest napisana jasno i przejrzysto z dużą dbałością o szczegóły. Parę drobnych błędów technicznych, które zauważyłam, a których nie będę tu przytaczać nie umniejszają jej wartości.

Praca zawiera wiele cennych i wartościowych wyników, które poszerzają naszą wiedzę o nanoukładach o geometrii kropek kwantowych na bazie grafenu. Wyniki tej pracy są istotne, ponieważ stanowią bazę teoretyczną dla układów które można obecnie konstruować przy pomocy wyrafinowanych metod nanotechnologii, a które będą pracowały na bazie praw mechaniki kwantowej.

Praca spełnia wszystkie wymagania stawiane pracom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie mgra Dariusza Żebrowskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Jako, że pracę oceniam wysoko wnoszę o jej wyróżnienie.

Katowice 30.8.2017

Prof. dr hab. Elżbieta Zipper