

Kraków, dn. 8 maja 2023 r.

dr hab. Przemysław Piekarczyk
Instytut Fizyki Jądrowej
Polskiej Akademii Nauk
ul. Radzikowskiego 152
31-342 Kraków

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. inż. Krzysztofa Maćkosza
pt. „Struktura atomowa i transport elektronowy w nanostrukturach
kanonicznych izolatorów topologicznych”

1. Tematyka i cel rozprawy doktorskiej.

Izolatory topologiczne to nowa klasa materiałów, których własności elektronowe zostały przewidziane teoretycznie, a następnie potwierdzone eksperymentalnie. Objętościowe stany elektronowe, posiadające przerwę energetyczną typową dla izolatorów, różnią się od metalicznych stanów powierzchniowych mających kształt stożków Diraca. Ze względu na silne sprzężenie spin-orbita stany te wykazują rozszczepienie spinowe prowadzące do unikalnych własności topologicznych i transportowych. Jeden z głównych kierunków badań nad tymi materiałami ma na celu stworzenie odpowiednich nanostruktur, które zachowują lub nawet wzmacniają efekty topologiczne w celu wykorzystania ich w nanoelektronice lub spintronice. Przedstawione w pracy doktorskiej badania, które dotyczą klasycznych izolatorów topologicznych, chalcogenków bizmutu, bardzo dobrze wpisują się w tę aktualną i ciekawą tematykę z pogranicza fizyki ciała stałego i nanotechnologii.

Głównym celem rozprawy jest zbadanie modyfikacji własności elektronowych i strukturalnych izolatorów topologicznych po zastosowaniu metod strukturyzacyjnych, takich jak nanolitografia oraz frezowanie zogniskowaną wiązką jonów (FIB). W pracy wykorzystano zarówno metody służące do wytwarzania urządzeń elektronicznych (litografia optyczna, litografia elektronowa i FIB), jak również liczne metody analityczne, w tym skaningową mikroskopię elektronową, transmisyjną mikroskopię elektronową, spektroskopię absorpcji promieniowania rentgenowskiego i transport elektronowy w ultra-niskich temperaturach. Przeprowadzono również badania teoretyczne struktury krystalicznej, gęstości stanów elektronowych oraz energii tworzenia domieszek i energii adsorpcji atomów na powierzchni izolatorów topologicznych opierając się na teorii funkcjonału gęstości (DFT).

2. Omówienie treści rozprawy.

Praca doktorska składa się z siedmiu głównych rozdziałów oraz kilku krótkich rozdziałów zawierających Streszczenie, Schemat pracy i Podsumowanie. Na końcu rozprawy zamieszczono bibliografię zawierającą 249 referencje. Całkowita ilość stron wynosi 130. Trzy pierwsze rozdziały zawierają informacje o badanych materiałach, ich własnościach elektronowych i budowie krystalicznej, oraz opisy metod analitycznych i technik nanowytwarzania, które obejmują metody litograficzne i technologię skupionej wiązki jonowej. Czwarty rozdział dotyczy pomiarów magnetotransportu i własności topologicznych stanów powierzchniowych. W pierwszej części opisane zostały szczegółowo schematy oraz metodologia wytwarzania nanostruktur do pomiarów transportu elektronowego. Kolejne etapy wytwarzania takich układów zostały przedstawione w postaci rysunków dobrze ilustrujących geometrię i szczegóły połączeń między poszczególnymi elementami nanourządzenia. Zamieszczone zostały również obrazy wytworzonych układów uzyskane przy pomocy skaningowego mikroskopu elektronowego. W dalszej części tego rozdziału opisane są zjawiska towarzyszące transportowi elektronów: oscylacje Shubnikova-de Haasa (SdH), słaba lokalizacja i słaba antylokalizacja. Omówiona została również zasada działania chłodziarki rozcieńczalnikowej $^3\text{He}/^4\text{He}$, która umożliwia pomiary przewodnictwa elektronowego w bardzo niskich temperaturach. Przedstawione badania dla płátka i struktury Bi_2Se_3 obejmują pomiary rezystywności, magnetooporu, rezystywności Halla, oscylacji SdH i fazy Berry'ego. Wyniki otrzymane dla płátka stanowią referencję do porównania z pomiarami dla struktury w kształcie typu Hall-bar wyciętej wiązką Ga^+ . Głównym celem tych badań jest potwierdzenie zachowania nietrywialnej topologii stanów powierzchni Bi_2Se_3 w układzie poddanym bombardowaniu wiązką jonów. Rozdział 5 przybliża badania składu chemicznego oraz struktury krystalicznej lokalnego otoczenia atomów Ga implantowanych w kryształach chalcogenków bizmutu. W dalszej części przedstawione zostały wyniki pomiarów techniką subtelnej struktury absorpcji promieniowania rentgenowskiego (XAFS) dla Bi_2Se_3 i Bi_2Te_3 wykonane na linii badawczej BM23 w Europejskim synchrotronie (ESRF) w Grenoble. Eksperymenty te pozwoliły określić preferencyjne położenia atomów Ga w strukturze krystalicznej badanych materiałów. Rozdział 6 przedstawia wyniki badania zmian strukturalnych indukowanych wiązką jonów Ga^+ i Xe^+ w zależności od napięcia przyspieszającego i natężenia prądu wiązki jonowej. Przeanalizowano rozmiary i kształt profili cięcia, jak również zmiany w strukturze krystalicznej trawionego materiału. Analizę

Przedstawione w rozprawie doktorskiej wyniki stanowią oryginalne rozwiązanie kilku problemów naukowych. Do najważniejszych należy zaliczyć:

1. Pokazanie, że strukturyzacja kryształu Bi_2Se_3 wiązką jonów Ga^+ pozwala zachować właściwości topologiczne tego materiału.
2. Określenie preferencyjnych pozycji obsadzeń implantowanych jonów Ga^+ w kryształach izolatorów topologicznych przy użyciu synchrotronowych pomiarów metodą XAFS.
3. Wykazanie, że przy zastosowaniu wiązki Xe^+ możliwe jest uzyskanie dwukrotnie większej szybkości trawienia kryształów chalcogenków bizmutu przy znacznie mniejszym zasięgu zniszczeń struktury krystalicznej w porównaniu do dział Ga^+ .
4. Wyliczenie energii formacji domieszek i energii adsorpcji dla atomów Ga i Xe oraz pokazanie, że w przypadku domieszki Xe nie jest możliwe wystąpienie takiego defektu sieci krystalicznej.

Prezentacja wyników w rozprawie doktorskiej jest bardzo klarowna. Rysunki są bardzo starannie wykonane i dobrze opisane. Jedyną uwagę mam do rysunków w rozdziale 7 przedstawiających gęstości stanów elektronowych, na których opisy osi i legendy są trudne do przeczytania ze względu na zbyt małą czcionkę. Wiele szczegółów struktury elektronowej związanych z kształtem pasm i występowaniem stożków Diraca można określić jedynie na podstawie analizy struktury pasmowej. Zamieszczenie takich przykładowych struktur w rozprawie ułatwiłoby taką analizę i umożliwiło dokładniejsze porównanie stanów elektronowych wewnątrz kryształu i na powierzchni izolatora topologicznego.

Jednym z celów badawczych rozprawy było określenie preferencyjnych położeń implantowanych atomów Ga. Taka analiza została wykonana, zarówno na podstawie pomiarów metodą XAFS, jak również z wykorzystaniem obliczeń DFT. Myślę, że bardzo pożyteczne byłoby porównanie wyników teoretycznych z eksperymentalnymi oraz przedyskutowanie rozbieżności między nimi. W szczególności pojawia się pytanie o preferencyjne położenie Ga w kryształach Bi_2Te_3 . Z pomiarów wynika, że atomy Ga implantowane za pomocą skupionej wiązki jonów w tym materiale obsadzają preferencyjnie pozycję tetraedryczną w przerwie van der Waals'a. Natomiast obliczenia pokazały, że najniższe energie formacji ma podstawienie za atom Bi oraz pozycja oktaedryczna w przerwie van der Waals'a.

Moja ocena merytoryczna rozprawy doktorskiej mgr. inż. Krzysztofa Maćkosza jest bardzo pozytywna, a przedstawione uwagi do prezentacji i dyskusji wyników nie mają wpływu na wniosek końcowy recenzji.

wykonano na podstawie wysokorozdzielczych obrazów otrzymanych metodami mikroskopii elektronowej TEM i STEM. W ostatniej części przedstawione zostały rezultaty symulacji metodą Monte Carlo (MC), które pozwoliły porównać trajektorie i rozkłady jonów Ga i Xe implantowanych w kryształach Bi_2Te_3 . Rozdział 7 zawiera wyniki obliczeń struktury kryształów oraz powierzchni obydwu izolatorów topologicznych, gęstości stanów elektronowych, jak również energie formacji domieszek i energie adsorpcji atomów Ga i Xe przy zastosowaniu metody DFT.

3. Ocena merytoryczna.

Rozprawa doktorska mgr. inż. Krzysztofa Maćkosza nie posiada tradycyjnej formy z wyraźnym podziałem na część teoretyczną i opis wyników. Trzy początkowe rozdziały stanowią bardzo dobrze opracowane wprowadzenie do tematyki badawczej, metod eksperymentalnych oraz najważniejszych procesów fizycznych analizowanych w rozprawie, pozwalające zrozumieć założone cele oraz prześledzić kolejne etapy badań. Każdy z kolejnych rozdziałów przedstawiających wyniki uzyskane w ramach pracy doktorskiej zawiera dodatkowe informacje na temat poprzednich badań w obrębie danej tematyki, stosowanych technik eksperymentalnych, infrastruktury pomiarowej lub metod obliczeniowych. W mojej opinii materiał zawarty w rozprawie doktorskiej prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną Autora, zarówno w dziedzinie fizyki ciała stałego, jak również w obszarze metodologii wytwarzania i charakteryzacji nanourządzeń.

W pracy doktorskiej analizowane są własności tylko dwóch izolatorów topologicznych na bazie bizmutu, ale zakres przeprowadzonych badań oraz użytych technik analitycznych jest bardzo szeroki. Prace doświadczalne obejmują proces wytwarzania nanourządzeń, pomiary podstawowych charakterystyk transportowych i topologicznych, implantację jonów Ga^+ i Xe^+ , pomiary synchrotronowe metodą XAFS, wykonywanie cięć profili przy pomocy wiązek jonowych oraz analiza struktury profili na podstawie obrazów z mikroskopów elektronowych. Autor rozprawy przeprowadził również badania teoretyczne izolatorów topologicznych w oparciu o symulacje MC i obliczenia z pierwszych zasad w ramach DFT. Praca doktorska jednoznacznie wykazuje umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej w bardzo wielu obszarach dotyczących wytwarzania i charakteryzacji próbek lub nanourządzeń, prowadzenia eksperymentów, także przy użyciu dużych urządzeń badawczych, jak również wykonywania obliczeń numerycznych i symulacji komputerowych.

4. Wniosek końcowy.

W mojej opinii przedstawiona do oceny rozprawa doktorska obejmuje bardzo szeroki i oryginalny materiał badawczy oraz stanowi znaczny wkład do badań własności izolatorów topologicznych. Uważam, że rozprawa spełnia wszystkie kryteria oraz wymagania stawiane pracom doktorskim i wnoszę do Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie o dopuszczenie Pana mgr. inż. Krzysztofa Maćkosza do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



dr hab. Przemysław Piekarczyk

