

Kraków 14.03.2016

prof. dr hab. inż. Bartłomiej Szafran
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
al. Mickiewicza 30, 30-059

Recenzja
pracy doktorskiej Pana mgr Grzegorza Ruta p.t.

Quantum transport of Dirac fermions in single and bilayer graphene: Chiral tunneling and quantum interference

Rozprawa została wykonana pod opieką dr hab. Adama Rycerza na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego, dotyczy opisu teoretycznego nanoukładów na bazie grafenu. Rozprawa mieści się na 52 stronach (w tym 6 rozdziałów, streszczenia w języku polskim i angielskim, oraz bibliografia). Rozdział pierwszy (*Introduction*) oraz drugi (*Methodology*) opisują kontekst i motywację badań oraz stosowane narzędzia badawcze. Pozostałe rozdziały stanowią skrótowe omówienie wyników z sześciu artykułów powstałych w czasie realizacji badań doktorskich. Publikacje przedstawiono jako integralną część rozprawy. Autorami wszystkich artykułów z cyklu są wyłącznie doktorant i promotor, przy czym doktorant występuje jako pierwszy autor. Zgodnie z załączonym do dokumentacji oświadczeniem promotora wkład doktoranta do artykułów w przedstawionym cyklu wynosi od 50% do 80 %. W cyklu są dwie prace opublikowane w *Physical Review B*, jedna w *Europhysics Letters*, jedna w *Journal of Physics Condensed Matter*, jedna w *Philosophical Magazine* oraz jedna (artykuł pokonferencyjny) z *Acta Physica Polonica A*.

Doktorant zajmował się opisem przewodnictwa elektrycznego grafenu ze szczególnym uwzględnieniem warunków transportu pseudodyfuzyjnego. Pod nieobecność zewnętrznego pola magnetycznego, w warunkach neutralności ładunkowej, tj. w punkcie Diraca, grafen wykazuje skończoną wartość przewodnictwa – mimo nominalnie zerowej gęstości nośników. W tych – niezwykle trudnych warunkach – transport ładunku zachodzi wyłącznie przez mody zanikające (*evanescent*) i jak pokazano w pionierskiej pracy z udziałem promotora rozprawy [J. Tworzydło, A. Rycerz i inni, *PRL* 96, 246802 (2006)], grafen w punkcie Diraca wykazuje własności elektryczne charakterystyczne dla klasycznego przewodnika z transportem dyfuzyjnym. Minimalna konduktywność – dla energii Fermiego w okolicach punktu Diraca – osiąga wartość $\sigma_0 = 4e^2/(\pi h)$ i pozostaje nieczuła na zaburzenia dalekozasięgowe ze względu na chiralną naturę nośników i brak przerwy energetycznej. Według wspomnianej wyżej pracy konduktancję układów skończonych można wyliczyć z klasycznego wzoru $G = \sigma_0 W/L$, o ile stosunek szerokości (W) przewodnika do jego długości (L) jest duży. Ponadto, w punkcie Diraca wielkości charakteryzujące szum śrutowy: czynnik Fano oraz trzecia kumulanta (czynnik R) osiągają wartości odpowiadające transportowi dyfuzyjnemu, odpowiednio 1/3 oraz 1/15. Według Kastnelsona [*Eur. Phys. J* 51 (2006) 157] efektywny nieporządek w punkcie Diraca ma być wprowadzany przez składową drżącą (*Zitterbewegung*) zależności operatora położenia od czasu w obrazie Heisenberga. W silnych polach magnetycznych (średnica cyklotronowa mniejsza niż długość przewodnika) warunki pseudodyfuzyjne występują w okolicach

poziomów Landaua, poza nimi transport ładunku jest wygaszony.

Rozprawa opisuje transport ładunku w warstwach pojedynczych oraz podwójnych grafenu. Dla dwuwarstw rozważana jest struktura atomowa w konfiguracji Bernala. W dwuwarstwie nośniki ładunku nabierają niezerowej masy efektywnej. Relacja dyspersji staje się z liniowej paraboliczna ze względu na złamanie równoważności podsieci trójkątnych każdej z warstw przez sprzężenie między nimi. Ponadto, różnica napięć między warstwami otwiera przerwę energetyczną w strukturze pasmowej. W pracy badane są przewodniki o geometrii prostokątnej oraz dyski Corbino. Te ostatnie, z elektrodami w środku i na obrzeżu okrągłego przewodnika, stanowią wdzięczny układ do badań, ze względu na symetrię obrotową i eliminację krawędzi grafenu. Doświadczalnie badano np. przewodnictwo dwuwarstwowego grafenu w dysku Corbino [Yan i Fuhrer, Nano Lett. 10 (2010) 4521]. Prace teoretyczne na temat transportu pseudodyfuzyjnego w dwuwarstwach były prowadzone wcześniej, lecz zawsze dla układów bez przerwy, tj. bez prostopadłego pola elektrycznego. Autor w ramach rozprawy zajmuje się tym – kluczowym dla dwuwarstw efektem. Prace na temat dysków Corbino przedstawione w rozprawie są kontynuacjami poprzednich prac promotora [minn. Phys. Rev. B 81 R121404 (2010); Phys. Rev. B 80 125417 (2009)] na temat monowarstw oraz przewodności i szumu śrutowego.

Autor rozprawy wiele uwagi poświęca efektom wprowadzanym przez parametry przeskoku skośnego w Hamiltonianie dwuwarstwy. Przeskoki skośne wprowadzają wtórne punkty Diraca do relacji dyspersji z trójkątnym spaczeniem (*trigonal warping*) struktury pasmowej wokół dolin [Cserti, i inni Phys. Rev. Lett. 99, 066802 (2007)] oraz zamkniętymi kieszeniami powierzchni Fermiego poza punktem neutralności ładunkowej. Pojawienie się większej liczby modów na powierzchni Fermiego nawet przy małych wartościach parametru przeskoku zwiększa wielokrotnie konduktywność dwuwarstwy.

Doktorant pracuje w ciągłym, niskoenergetycznym przybliżeniu hamiltonianu ciasnego wiązania z operatorem energii typu Diraca dla nośników z okolicy punktu neutralności ładunkowej pojedynczej doliny. Własności elektryczne układu autor wylicza według podejścia Landauera-Buettikera z rozwiązania kwantowomechanicznego problemu rozpraszania. Do rozwiązania problemu rozproszeniowego doktorant wykorzystuje dopasowywanie modów np. metodą macierzy transferu, która skleja rozwiązania w obszarze rozpraszania ze stanami asymptotycznymi kanałów. W dużej części rachunków autor uzyskuje rozwiązania analityczne. Dla bardziej złożonych problemów autor posiłkuje się rachunkiem numerycznym, które są szczegółowo omawiane i interpretowane, często z propozycją analitycznych formuł przybliżonych. Wszystkie rachunki dotyczą układów dwukońcówkowych. Przy skończonej szerokości okna transportu otwieranego np. przez napięcie źródło/dren, autor przywołuje formułę Lewitowa, z funkcją charakterystyczną pozwalającą na wyprowadzenie konduktywności, czynnika Fano oraz czynnika R, jako średnich z wyrażeń wykorzystujących elementy macierzy rozpraszania po oknie transportu.

Poniżej opisuję prace wchodzące w skład rozprawy.

1) Physical Review B 89, 045421 (2014), "Pseudodiffusive conductance, quantum-limited shot noise and Landau-level hierarchy in a biased graphene bilayer".

Przed tą pracą ustalono, iż pod nieobecność zewnętrznych pól w punkcie neutralności ładunkowej pseudodyfuzyjna konduktywność dwuwarstwy jest równa dwukrotności konduktywności grafenu jednowarstwowego [Kastnerson Eur. Phys. J. 2006; Snyman i Beenakker, Phys. Rev. B 75, 045322 2007, Cserti Phys. Rev. B 75 033405 2007]. W omawianej publikacji autorzy rozważają transport z zewnętrznymi polami. Przedmiotem badań jest prostokątny przewodnik. Autorzy stosują periodyczne warunki brzegowe w kierunku prostopadłym do kierunku przepływu prądu. Warunki periodyczne usprawiedliwione są przez dużą szerokość złącza i pozwalają na eliminację transportu krawędziowego. Dla punktu Diraca oraz dla energii Fermiego równej poziomom Landaua autorzy znajdują wartości pseudodyfuzyjne konduktancji, czynnika Fano oraz trzeciej kumulanty. W wysokim polu magnetycznym poza poziomami Landaua – gdzie transport ma charakter rezonansowy - konduktancja jest bliska zeru, a czynnik Fano przyjmuje wartość 1 jak dla złącza tunelowego. Autorzy następnie badają problem transportu przy skończonym napięciu źródło-dren lub fluktuacji domieszkowania (fluktuacji potencjałów chemicznych rezerwuarów) w okolicach rezonansów transmisji w wysokim polu magnetycznym. Wyniki dyskutowane są w funkcji bezwymiarowego parametru Δ - stosunku szerokości okna transportu na skali energii do szerokości rezonansu. Autorzy znajdują, że czynnik Fano osiąga wartość minimalną - pseudodyfuzyjną dla zerowej wartości Δ . Minimum czynnika R pojawia się natomiast dla $\Delta > 0$. Autorzy pokazują, że w granicy dużych wartości Δ , czynniki R oraz F przyjmują wartości 0.5 oraz 0.7, odpowiednio.

Wyżej omówione wyniki uzyskano z hamiltonianem, w którym uwzględniane były tylko parametry przeskoiku między ułożonymi wertykalnie w dwuwarstwie atomami węgla. Następnie badany jest problem przewodności elektrycznej dwuwarstwy dla hamiltonianu z uwzględnieniem przeskoków skośnych. Według wcześniejszych prac wykorzystujących formułę Kubo (Cserti i inni) dla niezerowych wartości parametru przeskoiku t' , minimalna konduktywność dwuwarstwy wzrasta trzykrotnie, to jest do sześciokrotności wartości dla monowarstwy. W pracach doświadczalnych obserwowano minimalną konduktywność odpowiadającą pięciokrotności konduktywności monowarstwy [Mayorov i inni, Science 333 860 2011]. W omawianym artykule autorskim po raz pierwszy zbadano problem wpływu elementów przeskoków skośnych dla konduktancji układów o skończonych rozmiarach. Okazało się, że choć istotnie uzyskuje się 6-krotność konduktywności w granicy nieskończonej długości przewodnika, dla przewodników o długości nawet kilku mikronów uzyskane wartości są istotnie niższe. Ten ważny wynik rzuca nowe światło na wynik doświadczenia.

2) Europhysics Letters 107 47005 (2014).

Minimal conductivity and signatures of quantum criticality in ballistic graphene bilayer.

List jest kontynuacją pracy z Phys. Rev. B. Autorzy zajmują się funkcją skalującą $\beta(\sigma) = d \ln \sigma / d \ln L$, używaną do charakteryzacji przejść metal/izolator, nieporządku oraz sprzężeń spin-orbita. Praca bada również orientację elektrod względem kierunków krystalicznych grafenu. Autor znajduje, że wartość graniczna przewodnictwa osiągnięta dla długich przewodników, jest stałym przyciągającym punktem funkcji skalującej. Wartość funkcji β znika dla nieskończonego L , przy jej ujemnej pochodnej, co istotnie wynika z analitycznej formuły przybliżonej podanej w pracy Phys. Rev. B, wiążącej konduktywność z długością przewodnika. W liście stwierdzona zostaje ciekawa analogia z zaburzonymi oddziałującymi układami dirakowskimi (Ostrovsky i inni PRL 105 (2010) 036803), która zasługuje na głębsze studium.

Autorzy kontynuują swoje wcześniejsze badania nad wpływem przeskoków skośnych w hamiltonianie dla niezerowej różnicy potencjałów na warstwach. Dla potencjałów elektrycznych na warstwach $\pm V/2$, przy energii nośników $\pm V/2$ odnajdywana jest wartość pseudodyfuzyjna jako lokalne maksimum przewodnictwa. Dla wyższych energii, wartości V oraz t' mają drugorzędne znaczenia dla konduktywności.

Następne prace w rozprawie dotyczą dysków Corbino.

3) Acta Physica Polonica A 126, 114 (2014), *Conditions for Conductance Quantization in Mesoscopic Dirac Systems on the Examples of Graphene Nanoconstrictions*. Badana jest granica mezoskopowa wycinku dysku Corbino dla monowarstwy. W 1994 roku Kirczenow [J. Phys.: Condens. Matter 6, L583], w związku z obserwacjami dla kwantowych kontaktów punktowych, pokazał kwantyzację konduktancji dysków Corbino na bazie półprzewodników III-V w funkcji energii Fermiego. Kirczenow znalazł tylko nieparzyste wielokrotności kwantu przewodności, co jest wynikiem degeneracji stanów o określonym momencie pędu (brak degeneracji stanu z momentem pędu 0, i podwójnej degeneracji wszystkich pozostałych). W dyskach na bazie grafenu kwantyzacja konduktancji w funkcji energii nie jest obserwowana. W pracy z Acta Physica, autorzy pokazali, że można ją zaobserwować dla wąskiego wycinku dysku (np. z kątem rozwarcia 12 stopni). Kwantyzacja konduktancji wyraźnie pojawia się na krzywych $G(E)$ – przy dowolnej wielokrotności jej kwantu. Autorzy pokazali również, że dla małego stosunku promienia zewnętrznego do wewnętrznego dysku: R_o/R_i pojawiają się oscylacje przewodności typu Fabryego Perota w funkcji R_i , które z kolei są reminiscencją silnych oscylacji występujących dla wstęgi grafenu o równoległych krawędziach. Nierównoległe krawędzie dla wycinku dysku Corbino znacznie ograniczają ich amplitudę.

4) Journal of Physics Condensed Matter 26 (2014) 485301, *Magnetoconductance of the Corbino disk in graphene: chiral tunneling and quantum interference in the bilayer case*. Praca omawia oscylacje konduktancji w funkcji strumienia pola magnetycznego przenikającego przez dysk, również z jedną z elektrod w stanie nadprzewodzącym, oraz zawiera porównanie dla układu z dwuwymiarowym gazem elektronowym. Dużym osiągnięciem pracy jest uzyskanie analitycznych rozwiązań dla problemu transmisji nośników. Praca stwierdza, że okres oscylacji dla dwuwarstwy i monowarstwy są identyczne i dyskutuje wpływ parametrów geometrycznych struktury na stosunek amplitud oscylacji konduktancji dwuwarstwy i monowarstwy (od 0 do 2), co wskazuje na obecność interferencji międzywarstwowej.

Układ wykazuje oscylacje przewodności – idealnie periodyczne ze strumieniem pola magnetycznego – w punkcie Diraca. Poza punktem Diraca oscylacje G znikają wraz ze zduszeniem transportu przy promieniu cyklotronowym mniejszym niż szerokość dysku. Dla próbki z różnicą napięć na warstwach stabilne oscylacje G dla wysokich strumieni przeżywają dla energii Fermiego $\pm V/2$. W wysokim polu magnetycznym transport ładunku obserwowany jest tylko przy energii Fermiego równej poziomom Landaua, z konduktancją będącą podwojeniem monowarstwowej dla najniższego poziomu Landaua, oraz równą wartości monowarstwowej dla wyższych poziomów Landaua.

5) Philosophical Magazine, 2015, *Quantum-limited shot noise and quantum interference in graphene-based Corbino disk*. Praca rozszerza znane wcześniej wyniki dla monowarstwy przy skończonej szerokości

okna transportu, w tzw. granicy szumu śrutowego (różnica potencjału znacznie większa niż energia termiczna). Omówione są własności statystyczne ładunku przechodzącego przez urządzenie w czasie Δt , opisane formułą Lewitowa, z której wyliczany jest następnie transfer ładunku i jego wyższe kumulanty. Niezmiernie ciekawym wynikiem jest wskazanie, że choć oscylacje Aharonova-Bohma przewodności zanikają dla niezerowej różnicy napięć, to są wciąż obecne w czynniku Fano.

6) Ostatnia praca to opublikowana w Physical Review B w roku 2016, *Trigonal warping, pseudodiffusive transport, and finite-system version of the Lifshitz transition in magnetoconductance of bilayer-graphene Corbino disk*, która donosi o spektakularnych efektach spaczenia trójkątnego dla własności elektrycznych dwuwarstwowych dysków Corbino.

Jedną z konsekwencji trójkątnego spaczenia struktury pasmowej wynikającego z przeskoków skośnych jest zaburzenie symetrii obrotowej i związany z nią fakt, iż moment pędu przestaje być określony w stanach własnych. Opis teoretyczny staje się trudniejszy technicznie, jako że problem nie daje się rozseparować do części radialnej i kątovej. Aby rozwiązać ten problem autorzy opracowali metodę macierzy transferu w przestrzeni momentu pędu. Praca uogólnia analizę skalowania jedno-parametrowego z Europhysics Letters na dyski Corbino. Przeprowadzone zostaje dopasowanie formuł teorii jedno-parametrowej do wyników numerycznych, które dobrze sprawdza się dla szerokich dysków. Autorzy pokazują, że dla niezerowych t' wartość konduktancji odbiega od wartości pseudodyfuzyjnej, lecz czynniki R i F zachowują wartości bliskie pseudodyfuzyjnym.

Autorzy znajdują również niezwykle ciekawe oscylacje przewodności typu Fabrygo – Perota odpowiadające przejściom między główną doliną w relacji dyspersji a dodatkowymi punktami Diraca wprowadzonymi przez przeskoiki skośne. W pracy przedstawiono dyskusję zachowania układu w prostopadłym polu magnetycznym. Autorzy zaczynają dyskusję odchodząc od geometrii Corbino do układu badanego wcześniej: prostokątnego przewodnika, z periodycznymi warunkami brzegowymi i z polem magnetycznym przyłożonym lokalnie prostopadle do powierzchni. Dla dużych przewodników ($L=480$ nm $W=10L$) dla niezerowego t' w punkcie neutralności pojawia się pik konduktywności dla skończonej wartości B . Autorzy wskazują, że pole magnetyczne, przy którym to maksimum występuje, odpowiada przesunięciom kwazipędów, związanym z odległością między głównym punktem Diraca a punktami dodatkowymi wprowadzonymi przy spaczeniu trójkątnym. Z tego względu autorzy identyfikują B przy którym występuje maksimum jako pole przejścia Lifshitz'a B_L . Dla mniejszych przewodników i mniejszych wartości W/L autorzy znajdują dudnienia w przewodnictwie jako funkcji B , przy czym okres oscylacji jest proporcjonalny do pierwiastka z (B/B_L) . Efekty spaczenia trójkątnego dla dysku Corbino, które zamykają pracę, zawierają cechy zidentyfikowane dla przewodnika prostokątnego.

Prace badawcze z rozprawy prowadzono w związku z grantami Narodowego Centrum Nauki Sonata Bis promotora, Preludium doktoranta, oraz w ramach projektu TEAM Fundacji na rzecz Nauki Polskiej prof. Józefa Spalka.

Przedstawione prace zawierają szczegółową dyskusję wyników oraz kontekstu ich umocowania w teorii transportu kwantowego grafenu. Skrótowe omówienie tych prac w rozprawie – przygotowane zostało starannie. Tekst samej pracy oraz artykułów napisane są świetnym, zniuansowanym angielskim.

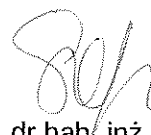
Uchybienia redakcyjne są nieliczne, w streszczeniu w języku polskim występuje "zerowej temperatury i zrowych pól". Na stronie 24 związek konduktancji z konduktywnością podany jest nieprawidłowo jako $\sigma = GW/L$. W odnośniku 61 nazwiska autorów zapisano małą literą.

W trakcie obrony doktorant mógłby wyjaśnić czy zaniedbanie pola magnetycznego w elektrodach i związana z nim nieciągłość pola magnetycznego na złączu elektroda / obszar rozpraszania pozostaje bez wpływu na wyniki. Autor konsekwentnie unikał krawędzi w obszarze rozpraszania, również dla prostokątnych półprzewodników. Jaki jest możliwy wpływ krawędzi na prąd i szum przy badanych warunkach transportu? W pracy zaniedbano rozpraszanie międzypolinowe, np. przez defekty sieci i zaburzenia krótkozasięgowe. Czy mogą one mieć wpływ na transport pseudodyfuzyjny? W metodzie macierzy transferu w przestrzeni momentu pędu (dwuwarstwowy grafen w dysku Corbino z uwzględnieniem skośnych przeskoków), jak duża podprzestrzeń trzeba uwzględnić dla uzyskania zbieżności rachunku?

W mojej ocenie przedłożona rozprawa doktorska spełnia z naddatkiem wszystkie warunki ustawowe i zwyczajowe stawiane pracom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów postępowania.

Uważam, że wyniki uzyskane przez doktoranta są bardzo cenne. Grafen dwuwarstwowy jest wskazywany jako obiecujący materiał dla elektroniki cyfrowej ze względu na możliwość kontrolowanego otwarcia przerwy energetycznej przez zewnętrzne pole elektryczne, co potrzebne jest do wyłączenia przepływu prądu. Badania przeprowadzone w ramach doktoratu ustaliły i wyjaśniły własności transportu, w tym pseudodyfuzyjnego, dla dwuwarstw z otwartą przerwą. Ponadto, doktorant wykazał występowanie międzywarstwowych efektów interferencyjnych. Praca w doktoracie była pierwszą, w której zbadano problem spaczenia trójkątnego dla układów skończonych. Rozprawa dostarcza wyjaśnienia obserwowanej wartości konduktywności dwuwarstwy (około pięciokrotność konduktywności monowarstwy σ_0 [Mayorov i inni, Science 333 860 2011]) przez fakt, iż wartość graniczna (sześciokrotność σ_0) osiągana jest dopiero przy długościach przewodników rzędu wielu mikronów. Ponadto, wyniki przedstawione w rozprawie wskazują na występowanie efektów interferencji między głównym i dodatkowymi punktami Diraca wprowadzonymi przez spaczenie trójkątne.

Ze względu na te osiągnięcia wnoszę o wyróżnienie rozprawy doktorskiej Pana Grzegorza Ruta.



prof. dr hab. inż. Bartłomiej Szafran