



Instytut Fizyki

Polska Akademia Nauk

Institute of Physics

Polish Academy of Sciences

Warszawa, 9.05.2023

dr hab. inż. Anna Wolska
Instytut Fizyki PAN
Al. Lotników 32/46
PL-02-668 Warszawa

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr. inż. Krzysztofa Maćkosza

pt. *Struktura atomowa i transport elektryczny w nanostrukturach kanonicznych izolatorów topologicznych*

Rozprawa doktorska mgr. inż. Krzysztofa Maćkosza pt. "Struktura atomowa i transport elektryczny w nanostrukturach kanonicznych izolatorów topologicznych" została przygotowana na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie pod kierunkiem dr. hab. inż. Marcina Sikory, prof. AGH. Praca poświęcona jest badaniom monokryształów izolatorów topologicznych.

Rozprawa doktorska liczy 130 stron. Składa się z siedmiu rozdziałów, podsumowania oraz bibliografii. Praca poprzedzona jest streszczeniem w języku polskim oraz rozdziałem zatytułowanym „Schemat pracy”, który zawiera krótki opis każdego z rozdziałów. Streszczenie w języku angielskim zostało dołączone osobno.

Rozdział pierwszy zawiera krótkie wprowadzenie, które jest też częściowo motywacją pracy. W rozdziale drugim wymienione są metody wytwarzania cienkich warstw oraz dokładniejszy opis metody wykorzystanej przez autora. Rozdział trzeci został poświęcony metodom analitycznym i

metodom nanoprodukcji ze szczególnym uwzględnieniem technologii trawienia zogniskowaną wiązką jonów (FIB). W rozdziale czwartym zostały przedstawione metody wykonania kontaktów do nanoobjektów oraz wyniki pomiarów magnetotransportu otrzymanych struktur. W rozdziale piątym rozważono obecność domieszki Ga w badanych strukturach z wykorzystaniem technik synchrotronowych. Rozdział szósty stanowi dokładny techniczny opis nanoformowania z wykorzystaniem techniki trawienia jonowego w zależności od parametrów pracy urządzenia. W rozdziale siódmym obecność domieszki Ga rozważana jest od strony modelowania metodą funkcjonału gęstości. Praca zakończona jest podsumowaniem. Załączona bibliografia jest bogata i zawiera 249 pozycji. Najstarsze cytowane prace pochodzą z połowy ubiegłego wieku, najnowsze zaś są z 2021 roku.

Doktorant jest współautorem 8 publikacji w dobrych czasopismach (IF od 3.46 do 7.39). W żadnej z nich nie jest pierwszym autorem, ani autorem korespondencyjnym. Tylko jedna z nich wydaje się być w temacie pracy doktorskiej. Wg Web of Science prace te cytowane są 10 razy, co jest rozsądną liczbą biorąc pod uwagę, że pierwsza z nich pochodzi z roku 2020.

Doktorant aktywnie prezentował wyniki swoich badań na konferencjach naukowych zarówno w postaci plakatów (6), jak i referatów (4). Brał udział w warsztatach naukowych. Przeprowadzał badania na źródłach synchrotronowych, a także z wykorzystaniem aparatury laboratoryjnej. Ponadto uczestniczył w organizacji konferencji, festiwali naukowych i warsztatów dla dzieci, co wskazuje na angażowanie się w prace służące środowisku naukowemu oraz w popularyzację nauki.

W swojej rozprawie doktorant skupił się na chalcogenkach bizmutu Bi_2Se_3 i Bi_2Te_3 . Związki te są klasycznymi izolatorami topologicznymi. Przewiduje się, że będą miały zastosowanie w nowoczesnej elektronice przy produkcji nanoukładów. W związku z tym istotne jest przeprowadzenie badań nad uzyskaniem prototypowych nanostruktur o pożądanych kształtach i zbadanie ich właściwości, które mogą się różnić od właściwości struktur makroskopowych. Doktorant w swojej pracy przetestował kilka metod uzyskiwania nanopłatków oraz wytwarzania nanostruktur dochodząc do wniosku, że tylko metoda trawienia jonowego pozwala na uzyskanie struktur o pożądanym kształcie. Poświęcił też sporo czasu na znalezienie najbardziej efektywnego sposobu dołączania kontaktów do uzyskanych nanostruktur. Wykonał badania magnetotransportu w niskich temperaturach zarówno dla płatka, jak i struktury Bi_2Se_3 wytrawionej skupioną wiązką jonów Ga^+ . Ustalił, że strukturyzacja wiązką nie powoduje zaburzenia właściwości topologicznych tych kryształów.

Następnie doktorant zajął się charakterystyką zmian strukturalnych indukowanych poprzez wykorzystanie jonów Ga^+ . Przede wszystkim ustalił, że podczas trawienia możliwa jest implantacja jonów Ga^+ . Badania absorpcji rentgenowskiej wykazały, że jony Ga^+ mogą lokować się w badanej strukturze. Za pomocą transmisyjnego mikroskopu elektronowego doktorant bardzo dokładnie i systematycznie przestudiował wpływ parametrów wiązki jonów Ga^+ na

zmiany struktury indukowane podczas trawienia. Przedstawił również analogiczne badania dla struktur trawionych wiązką jonów Xe^+ . Wymodelował ponadto zasięg interakcji wiązki jonów Ga^+ oraz Xe^+ wykorzystując symulacje Monte Carlo. Na koniec swoje badania uzupełnił symulacjami teoretycznymi wykorzystując metodę funkcjonału gęstości (DFT).

Praca zawiera wiele cennych wyników. Za szczególnie istotne uważam próby ustalenia jaki wpływ na strukturę i własności ma proces implantacji jonów Ga^+ , który zachodzi podczas trawienia jonowego. Także wyniki mikroskopii elektronowej dla trawienia jonowego wiązką Xe^+ zasługują na uwagę. Jednakże podczas lektury pojawia się wiele pytań, na które w pracy nie znajdujemy odpowiedzi. Mam nadzieję, że doktorant udzieli na nie odpowiedzi w czasie obrony. Przede wszystkim to, że chociaż praca poświęcona jest krysztalom Bi_2Se_3 i Bi_2Te_3 , to w wielu miejscach wyniki dla Bi_2Te_3 nie są prezentowane. Np. nie wiadomo, czy nanostrukturyzacja i prace nad wykonaniem kontaktów były prowadzone także dla Bi_2Te_3 .

Jako niespecjalista w tej dziedzinie, nie podejmuję się oceny pomiarów magnetotransportu od strony merytorycznej. Mam natomiast kilka uwag technicznych. Brakuje mi informacji dlaczego badania te zostały wykonane tylko dla Bi_2Se_3 , z pominięciem Bi_2Te_3 . Ponadto bardzo pomocne dla czytelnika byłoby także bezpośrednie porównanie uzyskanych wyników dla obu struktur Bi_2Se_3 .

Analiza mapy fluorescencji została pokazana dla wytrawionego krysztalu Bi_2Se_3 . Nie ma natomiast informacji o tym, czy zależności znalezione dla wytrawionego krysztalu Bi_2Te_3 są analogiczne. Doktorant nie przedstawił też argumentów dlaczego do badań absorpcji rentgenowskiej z dziewięciu wytrawionych obszarów wybrał akurat ten trawiony jonami o napięciu przyspieszającym 30 kV i dawce $0.1 \text{ nC}/\mu\text{m}^2$.

Widmo XANES dla Bi_2Se_3 jest dosyć słabej jakości. Trudno w tym przypadku wyciągać wiążące wnioski co do struktury. Główną wskazówką, że otoczenie Ga w Bi_2Se_3 i Bi_2Te_3 może być różne, jest przesunięcie krawędzi absorpcji. Teoretyczne symulacje widm XANES w zależności od umiejscowienia domieszki to prawidłowe podejście. Szkoda, że wykresy są na tyle małe, że trudno z nich zbyt dużo odczytać.

Doktorant przeprowadził również obliczenia DFT dla struktur z zaimplantowanymi jonami Ga^+ . Co ciekawe w przypadku Bi_2Te_3 wyniki DFT wskazują, że najbardziej prawdopodobna jest pozycja podstawieniowa atomów Bi. Symulacje widm XANES tego nie potwierdzają. Nasuwa się pytanie, co jest tego przyczyną? Warto byłoby też wykonać obliczenia widm XANES dla struktur zrelaksowanych uzyskanych z symulacji DFT.

W symulacjach DFT energie adsorpcji jonów Ga^+ (Xe^+) były liczone tylko przez próbkowanie odległości dodatkowego atomu Ga (Xe) od powierzchni zrelaksowanego chalcogenku. Czy były wykonane próby relaksacji całego modelu powierzchni (pomijając atomy, które mają „udawać”

wpływ fazy objętościowej)? Wydaje się, że przy adsorpcji Ga (Xe) powinna wystąpić też relaksacja powierzchni.

Interpretacja symulacji adsorpcji Xe^+ na powierzchni Bi_2Se_3 i Bi_2Te_3 budzi nieco wątpliwości. Podane różnice wartości energii dla poszczególnych pozycji są na poziomie setnych eV, czyli są na granicy dokładności DFT. Trudno stąd wnioskować, która pozycja jest najbardziej stabilna.

Niestety, od strony edytorskiej praca budzi wiele zastrzeżeń. Być może jest to efekt zbyt dużego pośpiechu, jednak rozprawa doktorska powinna reprezentować nie tylko wysoki poziom merytoryczny, ale też edytorski. Brakuje wyraźnej granicy pomiędzy przeglądem literaturowym, a wynikami uzyskanymi przez doktoranta. Przydałyby się też krótkie podsumowania na końcu każdego rozdziału eksperymentalnego np. takie, jakie jest w rozdziale 6. Na początku pracy nie ma wyraźnej tezy i celu. Dopiero podsumowanie wyjaśnia dlaczego doktorant zajął się tymi materiałami.

W pracy można znaleźć dużo literówek, błędów interpunkcyjnych, gramatycznych, składniowych oraz błędy ortograficzne. W kilku przypadkach zła składnia wręcz uniemożliwia zrozumienie tego, co autor chciał przekazać. Ponadto do kilkudziesięciu rysunków brakuje odniesienia w tekście. Zdarza się też, że odniesienia skierowane są do niewłaściwych rysunków. Bardzo też brakuje wykazu skrótów i symboli użytych w pracy. Byłoby to bardzo pomocne, zwłaszcza że zdarza się, że jakiś skrót jest używany wcześniej, a definicja jest podana kilka stron dalej. Zestawienie błędów i uwag edytorskich zawarte jest w załączniku 1.

Powyższe uwagi nie umniejszają wartości naukowej pracy. Doktorant wykazał się samodzielnością naukową i pracowitością. Praca zawiera szeroki zakres materiału i należy docenić to, że doktorant potraktował temat interdyscyplinarnie. Zaczął od testów wytwarzania i dołączania kontaktów do struktury, zbadał jej własności i rozważył jak wykorzystanie wiązki jonów może te własności zaburzać. Nie ograniczył się do jednej techniki eksperymentalnej, a dodatkowo skorzystał z możliwości jakie dają symulacje teoretyczne.

Stwierdzam, że przedstawiona praca doktorska mgr. inż. Krzysztofa Maćkosza spełnia ustawowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim (Ustawa z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce) i wnoszę do Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Fizyczne AGH o dopuszczenie mgr. inż. Krzysztofa Maćkosza do dalszych etapów procedury doktorskiej.

Anne Wolska