

Prof. dr hab. Tadeusz Domański  
Katedra Fizyki Teoretycznej,  
Instytut Fizyki UMCS,  
20-031 Lublin

Lublin, 15 lipca 2021 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej mgra Bartłomieja Rzeszotarskiego  
zatytułowanej „**Transport ładunku i spinu w nanoukładach  
na bazie silicenu**”

Przedłożona praca doktorska dotyczy unikalnych właściwości silicenu, czyli poświadczanej kwazidwuwymiarowej struktury atomów krzemu uporządkowanych w sieć typu plastrów miodu. Pozapłaszczyznowe odchylenie (na odległość  $\sim 0,46 \text{ \AA}$ ) atomów tworzących podsieć A i B daje wkład do efektywnego oddziaływania spinowo-orbitalnego wędrownych elektronów. W realnych warunkach występuje wówczas zarówno sprzężenie typu Rashby pomiędzy elektronami na sąsiednich atomach (zaindukowane siłą w kierunku prostopadłym do płaszczyzny krzemowej) jak też sprzężenie typu Kane-Mele (związane ze skrzyżnością w przeskoku elektronów do kolejnych sąsiednich atomów). Oba te rodzaje oddziaływań spinowo-orbitalnych mają kluczowe znaczenie dla funkcjonalizowania wstęp silicenowych w obecności zewnętrznego pola elektrycznego i magnetycznego. Doktorant przeprowadził analizę charakterystyk transportu ładunkowego i spinowego w kilku konfiguracjach, które mogą być przydatne dla kwantowej inżynierii dirakowskich stanów elektronowych silicenu.

Praca doktorska została przygotowana na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie. Promotorami rozprawy są prof. dr hab. Bartłomiej Szafran i prof. dr hab. Andrzej Koleżyński. Funkcję promotora pomocniczego pełniła dr inż. Alina Mreńca-Kolasińska. Na rozprawę składa się cykl (spójnych tematycznie) czterech publikacji oraz jednego artykułu dostępnego w bazie preprintów. Zgodnie z załączonymi deklaracjami współautorów udział Doktoranta w tych pracach był zasadniczy. Doktorant przygotował również 30-stronicowy przewodnik, w którym precyzyjnie nakreślił motywację swoich badań, opisał charakterystyczne właściwości elektronów w silicenie, podał szczegóły metodyczne obliczeń właściwości transportowych oraz uzasadnił dobór parametrów efektywnego modelu ciasnego wiązania w oparciu o obliczenia przeprowadzone metodą funkcjonału gęstości dla silicenu na podłożu InSe. W dalszej części przedstawię przegląd ważniejszych wyników opisanych w artykułach, stanowiących rozprawę doktorską mgra Rzeszotarskiego .

[1] *Electron spin inversion in gated silicene nanoribbons*

B. Rzeszotarski & B. Szafran, Phys. Rev. B **98**, 075417 (2018).

Rozpatrzono efektywność reorientacji spinu propagującego przez nanowstęgę silicenową umieszczoną w konfiguracji tranzystorowej pomiędzy elektrodą źródła i drenu w obecności potencjału bramki. Do opisu układu wykorzystano realistyczny model ciasnego wiązania (z uwzględnieniem wyrazu kinetycznego, oddziaływania z polem elektrostatycznym, sprzężenia spinowo-orbitalnego oraz wpływu pola magnetycznego) i przeanalizowano prawdopodobieństwo transmisji poszczególnych modów transportowych z rozdzielczością spinową. Dla propagacji spinu (wstrzykniętego z elektrony źródła) istotne znaczenie miały warunki brzegowe oraz rywalizacja oddziaływań spinowo-orbitalnych. Oddziaływanie typu Rashby indukuje wewnętrzne pole magnetyczne dążące do ustawienia spinu w płaszczyźnie silicenowej (równoległe do osi  $x$ ) natomiast sprzężenie typu Kane-Mele dąży do reorientowania spinu w kierunku prostopadłym do nanowstęgi silicenowej.

Autorzy zbadali konsekwencje tej rywalizacji we wstędze silicenowej o szerokości  $\sim 5$  nm (28 atomów) i długości  $\sim 1$   $\mu$ m, zakładając wyjściową polaryzję spinu w kierunku osi  $z$ . Dla geometrii typu zygzak w obecności poprzecznego pola elektrostatycznego ( $1$  V/Å) wykazano, że bez oddziaływania Rashby spin uległby pełnemu odwróceniu na odległości 842 nm zaś dla realistycznej wartości sprzężenia Rashby ( $\lambda_{SO} = 3,9$  meV) spin jest niemal utrzymywany w pierwotnym kierunku z niewielkimi oscylacjami o okresowości 67,4 nm (rysunek 3b). W przypadku geometrii typu fotelikowatego mody transportowe doliny  $K$  i  $K'$  mieszają się ze sobą, osłabiając skuteczność oddziaływania typu Kane-Mele. W rezultacie taki układ umożliwia inwersję wyjściowego spinu, co może być przydatne do praktycznych zastosowań. Autorzy zbadali następnie skuteczność przeorientowania spinu wyjściowo spolaryzowanego w kierunku osi  $x$  (rozdział III.B). W tym przypadku nanowstęga silicenowa typu zygzakowatego umożliwia inwersję spinu płaszczyznowego. W obecności pola elektrostatycznego  $0,1$  V/Å długość precesji spinu jest stosunkowo krótka (około 10 nm dla niedużej energii Fermiego). Zależna od energii Fermiego długość precesji może być dostrojona poprzez przyłożenie odpowiedniego pola elektrycznego.

W rozdziale III.C zaproponowano schemat urządzenia do detekcji odwróconego spinu z wykorzystaniem dwóch ferromagnetycznych przyłączy i elektrody bramki zetkniętej z fragmentem wstęgi silicenowej. Konfiguracja umożliwia selektywną przepuszczalność spinu spolaryzowaną równoległe do osi  $x$  dzięki dostrojeniu energii Fermiego za pomocą doboru odległości  $L_0$  między ferromagnetykami i obszarem bramkującym o ustalonej szerokości  $L$ . Autorzy zbadali stabilność pracy takiego urządzenia w obecności domieszek elektrostatycznych. Stwierdzono, że obecność domieszek nie wpływa znacząco na inwersję spinu, o ile znajdują się one w bezpiecznej odległości od brzegów nanowstęgi silicenowej.

[2] *Electron interferometry and quantum spin Hall phase in silicene*

B. Rzeszutarski, A. Mreńca-Kolasińska & B. Szafran, Phys. Rev. B **99**, 165426 (2019).

Autorzy zaproponowali konstrukcję interferometru do detekcji fazy kwantowego spinowego izolatora Halla (QSH) w nanoukładzie na bazie silicenu, która charakteryzuje się występowaniem spinowo-rozdzielczych prądów brzegowych. W przypadku pofałdowanej płaszczyzny krzemowej mechanizm fazy QSH wywodzi się z oddziaływania spinowo-orbitalnego typu Kane-Mele (który zapewnia proces przeskoku elektronowego pomiędzy kolejnymi sąsiednimi atomami krzemu ze współczynnikiem o znaku zależnym od skrętności *clockwise/anticlockwise*). Uwzględniając realistyczne wartości parametrów modelu ciasnego wiązania autorzy rozpatrzyli dwa warianty interferometru do detekcji fazy QSH.

W pierwszym wariantcie rozpatrzono połączenie wyjściowej elektrody z detektorem nanowstęgami o zygzakowatych brzegach, które są rozdzielone przestrzennie w obszarze przyłożonego z zewnątrz gradientu pola elektrostatycznego. Rolę detektora pełni półpłaszczyzna silicenowa zetknięta z nanowstęgami. Przepływ spinowo-zależnych prądów brzegowych zbadano numerycznie w schemacie macierzy transmisji, wykorzystując procedurę sklejaną funkcji falowej. Numeryczną wartość przewodnictwa liniowego wykreślono w funkcji pola magnetycznego skierowanego prostopadle do silicenowych nanowstęg. Poza obszarem realizacji kwantowego spinowego efektu Halla układ jest analogiczny do standardowego dwuszcelinowego interferometru Younga (charakterystyczne oscylacje Aharonova-Bohma pokazano na rysunku 2). W fazie QSH propagacja modów brzegowych ma natomiast odmienny charakter (rysunek 3). Można w tym przypadku wskazać warunki rezonansowej propagacji, które nie mają nic wspólnego z interferencją Aharonova-Bohma. Istotę tego zjawiska w bardzo klarowny sposób ilustrują mapy spinowo-zależnej gęstości prądu pokazane na rysunku 4. Lokalne pole elektryczne wpływa destrukcyjnie na cechy rezonansowej propagacji prądów brzegowych. Przedyskutowano też kompozycję nanowstęg silicenowych w geometrii typu pierścieniowego (rozdział III.B). Faza QSH jest wówczas obserwowalna poprzez zanik przewodnictwa (zamiast rezonansów), których pochodzenie jest tej samej natury co w poprzedniej geometrii.

Autorzy zaproponowali więc oryginalny i empirycznie realizowalny schemat urządzeń interferencyjnych do detekcji fazy QSH w nanowstęgach silicenowych, gdzie dzięki wykorzystaniu pola elektrycznego można w kontrolowalny sposób blokować lokalny przepływ prądu otwierając przerwę energetyczną.

[3] *Topologically protected wave packets and quantum rings in silicene*

B. Szafran, B. Rzeszutarski, A. Mreńca-Kolasińska, Phys. Rev. B **100**, 085306 (2019).

Artykuł opisuje inżynierię stanów elektronowych oraz nietrywialną dynamikę pakietów falowych w pojedynczej i podwójnej warstwie silicenowej ze szczególnym uwzględnieniem protekcji topologicznej. Zasadnicze obliczenia przeprowadzono dla układu o rozmiarach  $600 \text{ nm} \times 600 \text{ nm}$ , zakładając dwie krawędzie o geometrii zygzakowej ( $y = \pm 300 \text{ nm}$ )

i dwie krawędzie typu fotelikowego ( $x = \pm 300$  nm). W obliczeniach uwzględniono orbitalny (poprzez czynnik Peierlsa) oraz zeemanowski wpływ pola magnetycznego skierowanego prostopadle do nanowstęgi silicenowej. Układ ten został umieszczony między elektrodami bramkującymi o przeciwnie skierowanych polaryzacjach w poszczególnych połowach wstęgi silicenowej. Wybrano taki kształt potencjału  $V_A(x) = -V_B(x)$ , który indukował pole elektrostatyczne w wąskim obszarze (o szerokości około 10 nm) wokół zetknięcia ( $x = 0$ ) przeciwnie skierowanych potencjałów. W ramach modelu ciasnego wiązania z realistycznym doбором parametrów wyznaczono numerycznie ewolucję wyjściowej paczki falowej, stosując iteracyjnie procedurę Askara-Cakmacka.

W szczególności wykazano, że propagacja paczki odbywa się bez udziału drgań zerowych (Zitterbewegung), co wynika z dirakowskiego charakteru elektronów w silicenie. Na krawędzi zygzakowatej paczka zachowuje swój profil (analogicznie do dynamiki solitonowej) z tendencją do lokalizacji dzięki wpływowi modów brzegowych. W przypadku krawędzi fotelikowej odbita paczka falowa również zachowuje swój kształt, ale w pobliżu krawędzi nie pojawia się pik z powodu braku modów brzegowych. W dalszej części pracy zbadano propagację paczki falowej w obecności kwantowego pierścienia o promieniu 100 nm. Przeanalizowano przejście paczki falowej przez pieścię dla kilku wybranych wartości strumienia pola magnetycznego oraz określono wpływ elektrostatycznego defektu o kształcie lorentzowskim na efektywność rozpraszania międzypolinowego. Dynamikę paczki falowej w obecności takiego defektu zilustrowano na rysunku 8 (dla przypadku bez pola magnetycznego) oraz szczegółowo przeanalizowano w granicy dużego i małego rozmiaru paczki w porównaniu ze średnicą pierścienia. Ostatni fragment (rozdział III.G) jest poświęcony układowi na bazie dwuwarstwy grafenowej z podwójnymi pierścieniami kwantowymi. Dla krótkich pakietów wykazano, że prawdopodobieństwo rozpraszania wstecznego na punktowym defekcie ma periodyczność strumienia magnetycznego (który penetruje pierścień), zaś dla długich pakietów i w granicy stacjonarnej okresowość ulega podwojeniu.

- [4] *Aharonov-Bohm oscillations of four-probe resistance in topological quantum rings in silicene and bilayer graphene*, B. Rzeszotarski, A. Mreńca-Kolasińska & B. Szafran, Phys. Rev. B **101**, 115308 (2020).

Autorzy zaproponowali ciekawy pomysł kwantowego interferometru chiralnych modów zaindukowanych w silicenie oraz dwuwarstwie grafenowej na obszarach odwrócenia potencjału elektrostatycznego ukształtowanego w strukturze pierścieniowej. Zasadnicza idea bazuje na pomiarach prądowo-napięciowych w architekturze 4-terminalnej, umożliwiającej interferencję chiralnych modów pomimo braku mechanizmu wstecznego rozpraszania. Schemat tego interferometru przedstawiono na rysunku 1. Zjawiska transportowe zbadano w podejściu macierzy transmisji z użyciem realistycznych modeli ciasnego wiązania.

Rozpatrzono szczegółowo dwa warianty pomiarów przewodności/oporności dla konfiguracji prądowo-napięciowych pomiędzy sąsiednimi lub przeciwległymi elektrodami (rysunek 4). Konkretnie obliczenia numeryczne przedstawiono dla pierścienia o promieniu 100 nm i niewielkiej przestrzennej odległości odwrócenia potencjału  $\lambda = 4$  nm (rozdział III.A) oraz dla promienia 200 nm i wartości  $\lambda = 12$  nm (rozdział III.B). W transformatach periodycznej oporności względem pola magnetycznego (skierowanego prostopadle do płaszczyzny silicenowej) zauważono wyraźne wzmocnienia, gdy ścieżka interferencyjna jest wielokrotnością ćwiartki pierścienia. Analogiczne wyniki uzyskano dla interferometru na bazie dwuwarstwy grafenowej (rozdział IV).

Pomiary charakterystyk transportu w 4-terminalnym urządzeniu pozwalają więc rzeczywiście zaobserwować efekty interferencyjne typu Aharonova-Bohma pomimo braku rozpraszania wstecznego modów chiralnych, którym dolinowe stopnie swobody zapewniają ochronę topologiczną.

[S1] *Effective Landé factors for an electrostatically defined quantum point contact in silicene*, B. Rzeszotarski, A. Mreńca-Kolasińska, F.M. Peeters & B. Szafran, arXiv:2105.02843 (2021) preprint.

Autorzy oszacowali wartość czynnika Landégo dla silicenowej nanowstęgi o rozmiarach  $200 \text{ nm} \times 330 \text{ nm}$ , która w centralnej części zawiera kwantowy punkt kontaktowy (QPC) sterujący szerokością kanału przewodzenia. Rolę QPC spełniał potencjał bramkujący wybrany przez Autorów w postaci gaussowskiej o szerokości połówkowej 40 nm. Wartość czynnika Landégo  $g^*$  poszczególnych kanałów transportowych wyznaczono na podstawie map transkonduktancji, wykorzystując w tym celu charakterystykę prądowo-napięciową w podejściu macierzy transmisji obliczoną w granicy temperatury zera bezwzględnego. W ramach modelu ciasnego wiązania uwzględniono oddziaływanie spinowo-orbitalne, zarówno typu Kane-Mele jak też typu Rashby. Kluczowe znaczenie dla uzyskanych wartości liczbowych  $g^*$  miał kierunek zewnętrznego pola magnetycznego, który jest odpowiedzialny za rozszczepienie Zeemana oraz ewentualne efekty orbitalne (poprzez czynnik Peierlsa w całe przeskoku). Systematyczną analizę wyników dla nanowstęgi o brzegach typu zygzakowatego oraz fotelikowatego przedstawiono w rozdziale III. Najsilniejsze wzmocnienie czynnika Landégo stwierdzono dla pola magnetycznego prostopadłego do nanowstęgi silicenowej, gdzie w przypadku brzegów zygzakowatych oddziaływanie spinowo-orbitalne typu Kane-Mele powoduje znaczny wzrost rozszczepienia podpasm spinowych. Wartości czynnika Landégo poszczególnych konfiguracji pola magnetycznego i warunków brzegowych zostały zestawione przez Autorów w tabeli II.

W podsumowaniu, magister Bartłomiej Rzeszotarski przeprowadził skrupulatnie cenną analizę właściwości silicenu i nanoskopowych struktur na bazie wstęg silicenowych. Na podkreślenie zasługuje realistyczny dobór parametrów efektywnego modelu ciasnego wiązania uzyskany z obliczeń *ab initio* dla warstwy krzemowej osadzonej na podłożu selenku indu. W ramach takiego scenariusza Doktorant zbadał wpływ oddziaływania spinowo-orbitalnego typu Rashby i Kane-Mele na dirakowską naturę wędrownych elektronów w sieci atomów krzemu o kształcie plastrów miodu. Na podstawie obliczeń numerycznych zbadał efekty zaindukowane oddziaływaniami spinowo-orbitalnymi dla różnych konfiguracji zewnętrznego pola elektrycznego i magnetycznego, analizując właściwości transportowe w podejściu macierzy transmisji. Doktorant zaproponował oryginalny pomysł inwertera spinowego [1], detektora topologicznej fazy spinowego izolatora Halla [2] oraz 4-terminalnego interferometru modów krawędziowych bez rozpraszania wstecznego [4]. Oprócz tych inżynierskich aspektów Doktorant zbadał również nietrywialną dynamikę paczki falowej w pobliżu pierścienia kwantowego utworzonego elektrostatycznie w nanowstędze silicenowej [3] oraz wyznaczył efektywny czynnik Landégo nanowstęgi silicenowej, w której elektrostatycznie wyprofilowany kwantowy punkt kontaktowy steruje szerokością kanału transportowego [S1].

Z poznawczego punktu widzenia nurtuje mnie kilka pytań zainspirowanych problematyką niniejszej rozprawy, na które chciałbym prosić Doktoranta o odpowiedź lub komentarz podczas publicznej obrony pracy. W artykule [1] stwierdzono, że domieszki elektrostatyczne umieszczone blisko brzegów wstęgi silicenowej drastycznie modyfikują skuteczność odwracania spinu. Czy można określić w jaki sposób takie domieszki wpływają na propagujące mody brzegowe? Z własnego doświadczenia mogę powiedzieć, że w nadprzewodnikach topologicznych (o kształcie nanopasków) domieszki prowadzą do lokalizacji brzegowych modów Majorany. Może w przypadku nanowstęgi silicenowej realizuje się podobny scenariusz? Kolejne pytanie dotyczy publikacji [4], gdzie zaproponowano stałoprądowy interferometr chiralnych modów transportowych obserwowalnych w oscylacjach typu Aharonova-Bohma. Czy możliwe byłoby uogólnienie tego schematu na przypadek zmiennoprądowy (*ac interferometer*)? Na podstawie analizy dynamiki paczki falowej [3] charakterystyka transportowa takiego (hipotetycznego) interferometru pracującego w trybie zmiennoprądowym wydaje się być w zasięgu możliwości obliczeniowych Doktoranta. Ostatnia naiwna sugestia dotyczy ewentualnego osadzenia nanowstęg silicenowych na podłożu konwencjonalnych nadprzewodników, gdzie z połączenia zjawiska bliskości oraz oddziaływań spinowo-orbitalnych (zwłaszcza typu Kane-Mele) możliwe byłoby zrealizowanie topologicznej fazy nadprzewodzącej z propagującymi modami Majorany. Proszę Doktoranta o komentarz na temat szans realizowalności takiego zjawiska.

Warto również podkreślić inne osiągnięcia pana Rzeszotarskiego. Jest On współautorem trzech prac opublikowanych w Phys. Rev. B na temat: a) sterowalnego pułapkowania spinu elektronowego w silicenowej kropce kwantowej, b) spinowo aktywnych urządzeń na bazie heterostruktur grafen/WSe<sub>2</sub> oraz c) mechanizmu inwersji spinowej w nanowstęgach grafenowych. Na prowadzone przez siebie badania uzyskał Diamentowy Grant MNiSW realizowany w latach 2017-2021. Od września 2020 roku do stycznia bieżącego roku odbył staż naukowy na Uniwersytecie w Antwerpii (Belgia). Wielokrotnie brał aktywny udział w międzynarodowych konferencjach, prezentując plakaty (5 razy) oraz wygłaszając referaty lub seminaria (4 razy). Znakomicie świadczy to o predyspozycjach Doktoranta do pracy badawczej.

Z pełnym przekonaniem stwierdzam, że przedłożona rozprawa doktorska dostarcza cennego opisu jakościowych a nawet ilościowych charakterystyk silicenu i nanostruktur utworzonych na bazie wstęg silicenowych. Wyniki opublikowane w czterech artykułach i kolejnym preprincie mogą mieć istotne znaczenie do konstrukcji i praktycznego wykorzystania nowych urządzeń kwantowej inżynierii opartej na spintronice oraz dolinotronice. Praca spełnia wszystkie zwyczajowe i prawne wymagania do nadania stopnia doktora w dyscyplinie *nauki fizyczne*. Na tej podstawie wnioskuję więc do Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie o dopuszczenie magistra Bartłomieja Rzeszotarskiego do publicznej obrony i dalszych etapów przewodu doktorskiego.