

Kraków, 1 lutego 2021

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Macieja Bieńka pt. "*Electronic and optical properties of two-dimensional transition metal dichalcogenide crystals*"

Recenzowana rozprawa doktorska została wykonana w Katedrze Fizyki Teoretycznej Wydziału Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej, promotorami byli Prof. dr hab. inż. Arkadiusz Wójs (PWr) i Prof. Dr. Paweł Hawrylak (Uniwersytet w Ottawie, Kanada), zaś promotorem pomocniczym dr inż. Paweł Potasz (PWr). Rozprawa ma formę klasyczną, główny tekst liczy 92 strony w języku angielskim i jest podzielony na pięć rozdziałów, po których zamieszczono rozbudowany (39 stron, 11 podrozdziałów) dodatek zawierający informacje o stosowanych metodach obliczeniowych i liczne ilustracje ich działania na przykładach prostszych niż omawiane w tekście głównym, jak również spis literatury liczący 780 pozycji. Tekst uzupełniają streszczenia w języku angielskim i polskim, podziękowania, listy ilustracji i akronimów, oraz czterostronicowa prezentacja planu rozprawy, z wyszczególnieniem osobistego wkładu autora w wyniki opisane w dalszych rozdziałach i listą publikacji autora (w tym pięciu artykułów recenzowanych i dwóch preprintów, których wyniki zaprezentowano w rozprawie, oraz czterech pozostałych artykułów, których współautorem jest mgr Maciej Bieniek).

Dwuchalkogenki metali przejściowych, których przykładem jest będący zasadniczym tematem badań teoretycznych opisanych w rozprawie dwusiarczek molibdenu MoS_2 , tworzą dwuwymiarowe kryształy o ogromnym potencjale z punktu widzenia zastosowań praktycznych w różnych gałęziach elektroniki. Z tej perspektywy, szczególnie ciekawa jest odkryta około 10 lat temu własność monowarstwowego MoS_2 , który wykazuje silną absorpcję

światła widzialnego i fotoluminescencję (w szczególności, wyraźnie silniejszą niż dwu- i więcej warstwowy MoS₂). Podobne zjawisko zaobserwowano później także w innych dwuchalkogenkach.

W odróżnieniu od grafenu, który może być postrzegany w pierwszej kolejności jako układ umożliwiający weryfikację doświadczalną szeregu osobliwych przewidywań teoretycznych dla cząstek bezmasowych o spinie 1/2 obdarzonych ładunkiem elektrycznym, dwusiarczek molibdenu pozostaje materiałem, którego aspekty aplikacyjne wyraźnie wysuwają się na plan pierwszy. Z tego punktu widzenia, rozprawa doktorska mgr Macieja Bieńka jest ciekawa, ponieważ autor położył nacisk na fizykę i głębokie zrozumienie zjawisk zachodzących w wybranych nanoukładach na bazie MoS₂.

Omówię teraz krótko zawartość poszczególnych rozdziałów pracy.

Rozdział 1. (*Introduction*) stanowi zwięzłe wprowadzenie do tematyki kryształów dwuwymiarowych, zawiera przegląd podstawowych własności dwuchalkogenków metali przejściowych, oraz narzędzi teoretycznych używanych do ich opisu, ze szczególnym uwzględnieniem opisu wzbudzeń optycznych i struktury elektronowej kropek kwantowych.

W rozdziale 2. (*Electronic properties of single layer MX₂ crystals*) autor rozpoczyna prezentację własnych wyników, w pierwszej kolejności opisując minimalny, grafenopodobny model typu ciasnego wiązania dla MoS₂, który — przy odpowiedniej parametryzacji — dobrze odtwarza strukturę elektronową znaną z obliczeń *ab initio*. Dyskutowane są także efekty bliskości pasm (walencyjnego i przewodnictwa), współistnienia nierównoważnych dolin w relacji dyspersji, jak również efekty Landego i Zeemana.

Rozdział 3. (*Optical properties of MX₂: exciton theory*) poświęcony jest w całości badaniom własności optycznych wzbudzeń ekscytonowych w dwuchalkogenkach, które były modelowane numerycznie w ramach formalizmu konfiguracji oddziaływanie (ang. *configuration interaction*), sprowadzonego do efektywnego równania Bethe-Salpentera, rozwiązywanego następnie metodą ciasnego wiązania. Wyniki zaprezentowane w tym rozdziale dotyczą m.in. struktury subtelnej ekscytonu w MoS₂ oraz stanów naładowanych ekscytonów (tzw. trionów).

Rozdział 4. (*Physics of gate-defined quantum dots in MX₂ materials*), który kończy prezentację wyników doktoranta, poświęcony jest opisowi stanów

elektronowych kropek kwantowych, definiowanych elektrostatycznie, tj. z użyciem metalicznych bramek nałożonych na półprzewodnik dwuwymiarowy. Kropki te były modelowane poprzez wprowadzenie potencjału parabolicznego, który (w połączeniu z obecnością przerwy energetycznej) prowadzi do uwięzienia elektronów w pobliżu minimum potencjału. Doktorant zwraca uwagę na dwudolinową naturę stanów zlokalizowanych w takich kropkach, jak również wpływ efektów topologicznych na drabinę stanów. Bardzo ciekawym wynikiem jest istnienie tzw. stanów kwarkowych, o symetrii $SU(3)$ związanej z obecnością dolinowych stopni swobody. Prezentację wyników dopełnia szczegółowa dyskusja hierarchii spinowo- i dolinowo-rozszczepionych poziomów energetycznych w kropkach o różnym promieniu.

Przystępując do oceny przedłożonej rozprawy należy wskazać, że zawiera ona bez wątplenia szereg oryginalnych i ważnych wyników fizycznych doktoranta. W szczególności, warto tutaj wymienić:

- 1) wyprowadzenie równania typu Bethe-Salpintera dla ekscytonu,
- 2) opis struktury subtelnej ekscytonów dolinowych w dwusiarczku molibdenu i innych dwuchalkogenkach metali przejściowych,
- 3) zastosowanie modelu parabolicznej kropki kwantowej i dyskusję widma Focka-Darwina stanów kropek wytworzonych w MoS_2 .

Doktorant jest współautorem łącznie 10 artykułów w czasopismach recenzowanych, w tym m.in. jednej pracy w *Nature Communications* i czterech prac w *Physical Review B*, co niewątpliwie jest ponadprzeciętnym wynikiem na tym etapie pracy naukowej.

Niełatwo znaleźć słabe strony recenzowanej pracy doktorskiej; z obowiązku recenzenta odnotuję jedynie, że autor nie utrzymał się kilku błędów literowych, zaś niektóre rysunki (np. *Figure 4.1* na str. 98) są mało czytelne z powodu zestawienia elementów z czcionkami silnie różniącymi się rozmiarem. Dyskusyjna wydaje się także lista 780 pozycji literaturowych, z których zapewne liczne można by zastąpić odwołaniami do artykułów przeglądowych, omawiających np. zagadnienia mające wyłącznie znaczenie historyczne.

Nie jestem także przekonany, czy właściwą decyzją było pominięcie w pracy doktorskiej ciekawych wyników doktoranta dotyczących dwuwarstwy bizmutowej (zob. artykuł w *Journal of Physics: Condensed Mater* z 2017 roku). Układ ten ma sporo cech wspólnych z dwuchalkogenkami, które — notabene

— również nie tworzą płaskich monowarstw (jak grafen lub azotek boru). Wydaje się, że często dziś spotykana konstrukcja rozprawy w formie cyklu publikacji opatrzonych przewodnikiem byłaby lepszym sposobem zwartej a zarazem całościowej prezentacji dorobku naukowego doktoranta.

Pewne wątpliwości wzbudza również zastosowanie (patrz Rozdział 4.) "pudełka obliczeniowego" z periodycznymi warunkami brzegowymi. Choć podejście takie można zapewne uznać za typowe (tj. stosowane przez wielu badaczy) nie jest dla mnie do końca jasne, czy wyniki będą nierozróżnialne od analogicznych dla układu "fizycznego", tj. z krawędziami. W szczególności, jeśli kwantowanie geometryczne energii jest porównywalne z przerwą wydaje się, że sprzężenie dolinowych stopni swobody wprowadzone przez krawędzie może zauważalnie wpływać na strukturę stanów w pobliżu przerwy.

W podsumowaniu, nie mam wątpliwości, że przedstawiona mi do oceny rozprawa spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane pracom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie mgr. Macieja Bieńka do dalszych etapów postępowania doktorskiego.



Adam Rycerz