



Posudek oponenta diplomové práce

Název diplomové práce: Studium nanometrových struktur

Jméno a příjmení studenta: Aleksei Barulin

Jméno a příjmení oponenta diplomové práce včetně titulů a pracoviště:

Doc. Ing. Ivan Richter, Dr. , KFE FJFI ČVUT v Praze

1) Náročnost zadání:

velmi vysoká
 vysoká

průměrná
 podprůměrná

5) Odborná úroveň:

výborná
 velmi dobrá
 dobrá

uspokojivá
 dostatečná
 nedostatečná

2) Zvolené metody a postupy při řešení práce:

výborné
 velmi dobré
 dobré

uspokojivé
 dostatečné
 nedostatečné

6) Jazyková a textová úroveň:

výborná
 velmi dobrá
 dobrá

uspokojivá
 dostatečná
 nedostatečná

3) Správnost názvosloví:

výborná
 velmi dobrá
 dobrá

uspokojivá
 dostatečná
 nedostatečná

7) Grafická úprava:

výborná
 velmi dobrá
 dobrá

uspokojivá
 dostatečná
 nedostatečná

4) Správnost předložených výsledků:

výborná
 velmi dobrá
 dobrá

uspokojivá
 dostatečná
 nedostatečná

8) Student splnil zadání:

úplně
 částečně
 nesplnil

9) Dosažené výsledky, vlastní přínos a praktická využitelnost práce*:

viz posudek

10) Připomínky k práci*:

viz posudek

11) Otázky ke studentovi vztahující se k práci (budou zodpovězeny při obhajobě)*:

viz posudek

Doporučení k obhajobě:

doporučuji

nedoporučuji

Klasifikace diplomové práce:

A - výborně (1,0)

C - dobře (2,0)

E - dostatečně (3,0)

B - velmi dobře (1,5)

D - uspokojivě (2,5)

F - nedostatečně (4,0)

Datum: 9. 6. 2016

Podpis: Doc. Ing. Ivan Richter, Dr.

Oponentní posudek na diplomovou práci posluchače Alekseie Barulina na téma *Studium nanometrových struktur*

Předložená diplomová práce pana Alekseie Barulina, vykonaná na Katedře mikroelektroniky FEL ČVUT v Praze, je věnována teoretickým základům a zejména numerickým simulacím vybraných nanostruktur na bázi grafenu a SiC, partikulárně jejich vzájemnému spojení. Hlavní cíl práce přitom spočíval v seznámení se s teoretickými modely aplikovatelnými pro simulace, dále pro vybranou strukturu grafen - SiC provést detailní simulace, výsledky pak porovnat s dostupnými daty, ať již experimentálními, či z literatury. Takovéto nanoelektronické grafenové struktury dnes představují, díky svým novým fyzikálním vlastnostem, perspektivní a efektivní podstatnou část fyzikálně materiálového výzkumu, nejenom z pohledu nových fyzikálních vlastností, ale i možnostmi aplikací, zejména v nanoelektronice. Jedná se tedy o téma diplomové práce velmi aktuální. Práce tak představuje další užitečnou sondu do dané oblasti, v rámci pracoviště školitele.

Posuzovaná diplomová práce, psaná v anglickém jazyce, má 97 stran, obsahuje 33 obrázků, odkazů na literaturu je v závěru práce uvedeno 12. Práce je členěna do 6 hlavních, číslovaných kapitol, součástí je též zadání práce, česká a anglická anotace, (užitečný) seznam použitých zkratk (v angličtině ovšem nazvaný *Subscripts and superscripts?*), obsah práce a tři rozsáhlé dodatky (od strany 54 do strany 97), obsahující jednak vlastnosti SiC materiálu (dodatek A). Dodatky B a C obsahují rozsáhlé výpisy dvou vstupních souborů pro simulace (zde si dovoluji poznámku o zamyšlení se diplomanta nad vhodností uvádění takového zcela nepřehledného výpisu do dodatku ve vtištěné podobě, pokud je vůbec vhodné / užitečné ho uvádět, pak spolu s vysvětlujícím komentářem, ve vazbě na použitý nástroj, v celé podobě pak například na přiloženém CD). Po stručné úvodní kapitole, která se věnuje úvodu do grafenu a možností struktur na grafenu založených, se ve 2. kapitole autor věnuje rešerši grafenové elektroniky. Pozornost je nejprve věnována grafenové struktuře, dále zejména grafenovým nanopáskům (nanoribbons, GNR), jsou diskutovány dvě hlavní konfigurace – tzv. *armchair* (A-GNRs) a *zigzag* (Z-GNRs). Dále je pozornost krátce věnována karbidu křemíku (SiC), epitaxnímu růstu grafenu a zejména vlastnostem rozhraní grafen – SiC, ve dvou konfiguracích (*Si-face C-face*). Závěr této úvodní kapitoly je věnován schopnosti grafenu filtrovat spin, přizpůsobení rozhraní SiC pro navázání grafenové struktury a hydrogenaci grafenu. V následující kapitole 3 se autor věnuje kvantovému modelu pro popis studované struktury, konkrétně rozšířené Hückelově (EH) metodě, v porovnání s metodami funkcionálu hustoty (DFT) a těsné vazby (TB). Ve čtvrté kapitole již autor představuje jádro vlastní práce, jím provedené simulace v systému Virtual NanoLab (spolu atomistickým toolboxem), s grafickým rozhraním. Věnuje se nadefinování struktury, vytvoření geometrie, generaci skriptů a následně vlastním výsledkům. Práce je formálně zakončena stručným závěrem (5. kapitola), přehledem použité literatury (6. kapitola, 12 položek) a již výše zmíněnými 3 dodatky.

Co se týče formální stránky, práce je vypracována standardním způsobem. Bohužel, práce zřejmě byla vypracována ve velké časové tísně (anebo byla tato formální stránka prezentace textu podceněna), neboť formálním náležitostem nebyla věnována náležitá pozornost. Co se týče anglického jazyka, text je psán, pokud mohu posoudit, velmi dobrým jazykem, chyby a překlepy nejsou příliš časté (chybné odkazování na obrázky - ... *on Fig.X*). Také některé další aspekty jsou minimálně formálně nevhodné (např. nevhodné strukturování (nevyvážených) kapitol, s tím spojené zcela nevhodné (vzhledem k celkovému rozsahu práce) číslovaní obrázků ve 3 úrovních) či přímo chybné (na některé obrázky zcela chybí v textu nejen formální odkaz, ale i jakýkoliv komentář – je pak otázkou, proč jsou vlastně uvedeny). Dovedu si představit také lepší kvalitu u některých obrázků (zejména vlastních, když zřejmě bylo uplatněné pouhé přímé „vykopírování“ z použitého softwaru, bez dalších úprav). Zmíním ještě přehled citací, který je nejen formálně velmi nejednotný, ale jednotlivé položky jsou i věcně nesprávné, podstatné údaje přitom nejsou vůbec uvedeny (viz např. citace číslo [2], [4]. [6] a další. Nechápu zde příliš, proč diplomant nestihnul provést alespoň elementární kontrolu? Navíc, z věcného pohledu, u takového nového perspektivního tématu bych si také dovedl představit mnohem více citací než uvedených 12, řada uváděných netriviálních skutečností (zejména v úvodních rešeršních částech). Textu by také prospěly doplňující komentáře, jak v úvodní rešeršní části (psané velmi „hutným“ strohým, informačně nabitým jazykem, bez vysvětlení, takže řada aspektů není zřejmá, resp. v kontextu zanikne), tak bližší vysvětlení sledovaných a simulovaných efektů; zde je komentář často opravdu příliš stručný a řadu souvislostí musí pilný čtenář tušit nebo se domýšlet. Všechny tyto prohřešky ale neubírají na jisté kvalitě práce, hodnocené v dalším odstavci. Dle mého názoru je struktura vlastní práce zvolena vhodně, text je kombinací obecné rešerše, teoretických definic a jejich aplikací, spolu s přehledem výsledků, tomu odpovídá i standardní členění do kapitol textu.

Pokud se jedná o věcnou stránku, je zřejmé, že cíle předložené diplomové práce, tak jak byly zadány, byly splněny. Z odborného hlediska tak považuji práci za přínosnou a užitečnou pro další bádání na pracovišti. Diplomant tak dle mého názoru zvládl danou teoreticky poměrně náročnou problematiku v její šíři.

K předložené diplomové práci mám následující dotazy resp. připomínky, k některým z nich by se autor mohl (pokud tak již nebude učiněno v rámci vlastní prezentace) v rámci obhajoby vyjádřit, pokud čas dovolí:

- 1) Na s. 9 ve 2. odstavci, při představení grafenu, je zmíněna také nulová efektivní hmotnost elektronu. Prosím diplomanta o doplňující vysvětlení.
- 2) Má diplomant povědomí o dalších 2D materiálech, které se podobně jako grafen dnes aktuálně využívají, mohl by je ideově (výhody, nevýhody) s grafenem porovnat?
- 3) Na s. 11 v závěru 1. odstavce je zmíněno, že v praktických případech bývá Diracův bod posunut mimo nulové napětí. Mohl by diplomant toto komentovat?
- 4) Zajímá mne také komentář k hybridizaci vazeb grafenu, viz s. 12, obr. 2.1.1(b).
- 5) Jaké typy transportu elektronů jsou pro grafen možné / pozorované?
- 6) Diplomanta bych dále poprosil o elementární připomenutí významu pevnolátkového značení, v textu využívaném, např. (0001), <0001>, {0001}.
- 7) Na s. 22 v závěru 1. odstavce části 2.7 je zmíněno, že hrany v uspořádání A-GNR mohou mít jak metalický, tak polovodičový charakter, zatímco Z-GNR vždy metalický. Prosím o vysvětlení.
- 8) Jaká je spolehlivost simulací pomocí EH modelu? V části 4.1 je zmíněno, že použitý nástroj obsahoval též DFT simulace, ač výrazně časově náročnější. K evaluaci této spolehlivosti by pomohl např. kontrolní DFT výpočet na srovnávací platformě, která by to umožňovala, byť by trval podstatně delší dobu.
- 9) Má diplomant představu o dalších možných simulačních nástrojích, které by bylo možné pro jím prováděné úlohy použít? Mohl by se případně pokusit o jejich porovnání s jím využívaným nástrojem Atomistix ToolKit Virtual NanoLab?
- 10) Zajímaly by mne také praktické aspekty při simulacích, v rámci použití Atomistix ToolKit Virtual NanoLab nástroje, doby a přesnosti výpočtů, apod.
- 11) Konečně, zajímá mne diplomantův pohled na budoucnost a srovnání nanoelektroniky založené na uhlíku vůči standardní křemíkové nanoelektronice?

Závěrem lze konstatovat, že předložená diplomová práce pana Alekseie Barulina dle mého názoru splnila zadání, i přes řadu zejména formálních připomínek. Bylo dosaženo zajímavých výsledků, čímž se podařilo splnit i požadavky na tento typ práce kladené příslušnými předpisy. Pokud by byla patřičná pozornost věnována i formální stránce, vzniklo by dílo vyšší kvality. Jelikož předpokládám kladné zodpovězení všech dotazů a připomínek, diplomovou práci doporučuji k obhajobě. Z těchto zejména formálních důvodů je mé hodnocení stupněm **C (dobře)**, konečný verdikt nechávám na komisi, podle průběhu celé obhajoby.

Ivan Richter

V Praze dne 9. června 2016

Doc. Ing. Ivan Richter, Dr.
České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
Katedra fyzikální elektroniky
Břehová 7, 115 19 Praha 1
E-mail: ivan.richter@jfifi.cvut.cz