

Autoreferat

1. Imię i nazwisko

Benedykt R. Jany

2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe lub artystyczne –z podaniem podmiotu nadającego stopień, roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej

- 2011 Doktor nauk fizycznych, Rada Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie (29.09.2011), Tytuł rozprawy: "Leading Modes of the $3\pi^0$ production in proton-proton collisions at incident proton momentum $3.35\text{GeV}/c$ ", Opiekun: Prof. Dr hab. Zbigniew Rudy, praca doktorska wyróżniona przez Radę Wydziału
- 2006 Magister Fizyki, Rada Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie (07.06.2006), Tytuł rozprawy: "Assembly and measurements of the Electromagnetic Calorimeter components for "WASA at COSY" setup", Opiekun: Prof. Dr hab. Zbigniew Rudy, dyplom magisterski z wyróżnieniem

3. Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych lub artystycznych

- Październik 2017 - nadal, adiunkt w Zakładzie Fizyki Ciała Stałego, Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie
- 2012-2017, samodzielny fizyk w Zakładzie Fizyki Ciała Stałego, Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie
- 2006-2009, IKP Forschungszentrum-Juelich, Niemcy, wyjazd na stypendium związany z prowadzeniem badań naukowych do pracy doktorskiej

4. Omówienie osiągnięć, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późn. zm.). Omówienie to winno dotyczyć merytorycznego ujęcia przedmiotowych osiągnięć, jak i w sposób precyzyjny określać indywidualny wkład w ich powstanie, w przypadku, gdy dane osiągnięcie jest dziełem współautorskim, z uwzględnieniem możliwości wskazywania dorobku z okresu całej kariery zawodowej.

Osiągnięcie naukowe - cykl publikacji zatytułowany:

Oddziaływanie atomów złota z powierzchniami półprzewodników jedno (Ge) i wieloskładnikowych (AIII-BV) oraz przemiany fazowe im towarzyszące badane za pomocą technik mikroskopii elektronowej oraz narzędzi bazujących na Machine Learning

Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego:

- [H1] Franciszek Krok, Mark R. Kaspers, Alexander M. Bernhart, Marek Nikiel, **Benedykt R. Jany**, Paulina Indyka, Mateusz Wojtaszek, Rolf Möller, Christian A. Bobisch, Probing the electronic transport on the reconstructed Au/Ge (001) surface, *Beilstein journal of nanotechnology* 5, 1, (2014) (*Impact Factor 3.65, punktacja MNiSW [2014 A]: 30*)
- [H2] Marek Nikiel, **Benedykt R. Jany**, Konrad Szajna, Dominik Wrana, Arkadiusz Janas, Rafal Kozubski, Franciszek Krok, Dynamics of thermally induced assembling of Au nanoislands from thin Au layer on Ge(001), *CrystEngComm*, 18, 5674, (2016) (*Impact Factor 3.545, punktacja MNiSW [2016 A]: 35*)
- [H3] Marek Nikiel, **Benedykt R. Jany**, Dominik Wrana, Konrad Szajna, Franciszek Krok, SEM studies of vacuum conditions influence on thermally induced Au selforganization on Ge(001) surface, *Surface & Coatings Technology* (2015) autor korespondencyjny (*Impact Factor 4.158, punktacja MNiSW [2015 A]: 35*)
- [H4] **Benedykt R. Jany**, Nicolas Gauquelin, Tom Willhammar, Marek Nikiel, Karel H.W. van den Bos, Arkadiusz Janas, Konrad Szajna, Jo Verbeeck, Sandra Van Aert, Gustaaf Van Tendeloo, Franciszek Krok, Controlled growth of hexagonal gold nanostructures during thermally induced self-assembling on Ge(001) surface, *Sci. Rep.* 7, 42420 (2017) autor korespondencyjny (*Impact Factor 4.379, punktacja MNiSW [2017 A]: 40*)
- [H5] **Benedykt R. Jany**, Arkadiusz Janas, Franciszek Krok, Retrieving the Quantitative Chemical Information at Nanoscale from Scanning Electron Microscope Energy Dispersive X-ray Measurements by Machine Learning, *Nano Letters*, Volume 17, Issue 11, 6507-7170 (2017) autor korespondencyjny (*Impact Factor 11.189, punktacja MNiSW [2017 A]: 45*)
- [H6] Arkadiusz Janas, **Benedykt R. Jany**, Konrad Szajna, Aleksandr Kryshtal, Grzegorz Cempura, Adam Kruk, Franciszek Krok, Nanostructure phase and interface engineering via controlled Au self-assembly on GaAs(001) surface, *Applied Surface Science* 492 703–710 (2019) autor korespondencyjny (*Impact Factor 6.182, punktacja MNiSW [2019]: 140*)
- [H7] **Benedykt R. Jany**, Arkadiusz Janas, Franciszek Krok, Automatic microscopic image analysis by moving window local Fourier Transform and Machine Learning, *Micron* 130, 102800 (2020) autor korespondencyjny (*Impact Factor 2.251, punktacja MNiSW [2020]: 100*)
- [H8] **Benedykt R. Jany**, Arkadiusz Janas, Witold Piskorz, Konrad Szajna, Aleksandr Kryshtal, Grzegorz Cempura, Paulina Indyka, Adam Kruk, Aleksandra Czyrska-Filemonowicz, Franciszek Krok, Towards the Understanding of the Gold Interaction with AIII-BV Semiconductors at the Atomic Level, *Nanoscale* 12, 9067-9081 (2020) autor korespondencyjny (*Impact Factor 7.790, punktacja MNiSW [2020]: 140*)

[H9] Arkadiusz Janas, Witold Piskorz, Aleksandr Kryshstal, Grzegorz Cempura, Wojciech Bełza, Adam Kruk, **Benedykt R. Jany**, Franciszek Krok, Into the origin of electrical conductivity for the metal–semiconductor junction at the atomic level, Applied Surface Science Volume 570, 150958 (2021) autor korespondencyjny (Impact Factor 6.182, punktacja MNiSW [2021]: 140)

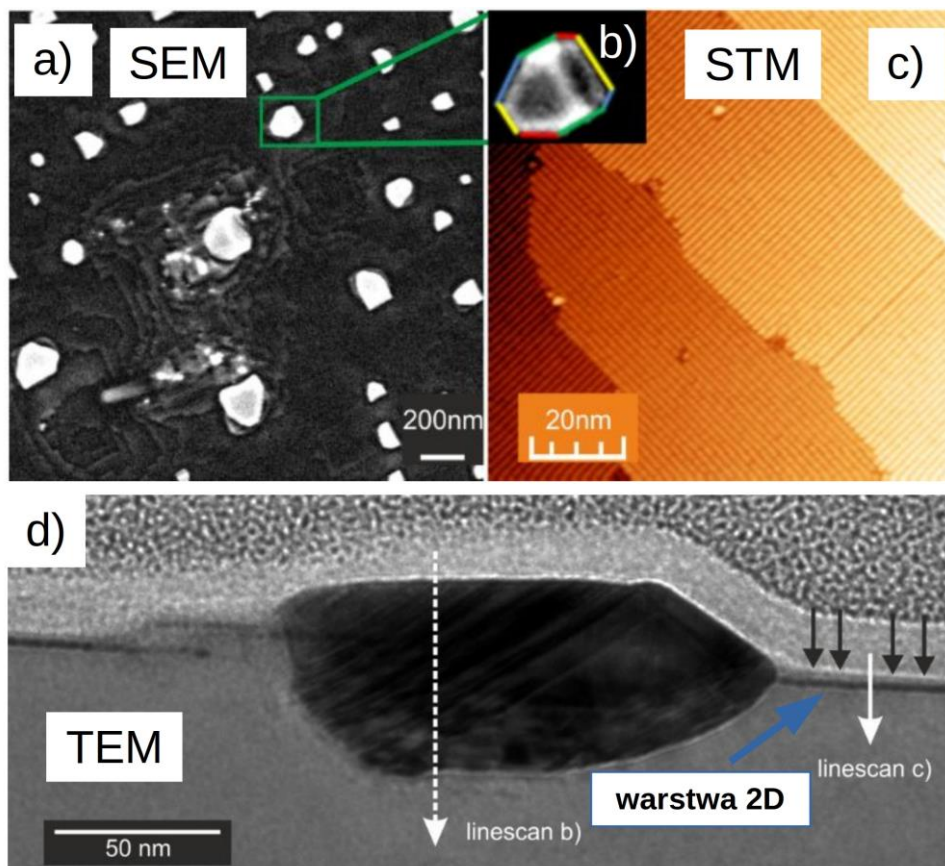
W nawiasie podano aktualny Impact Factor czasopisma oraz przypisaną liczbę punktów MNiSW w danym roku.

Wstęp

Oddziaływanie atomów metali, w szczególności atomów złota, z powierzchniami półprzewodnikowymi jest obecnie bardzo ważnym zagadnieniem. Złoto jest używane do wytwarzania kontaktów elektrycznych w większości stosowanych obecnie urządzeń elektronicznych opartych na półprzewodnikachⁱ. Bardzo obiecującymi metodami wytwarzania złotych nano-kontaktów są metody samoorganizacji na powierzchniach półprzewodników dzięki którym, w przeciwieństwie do metod litograficznych m.i. jest możliwe wytwarzanie nano-kontaktów na dużych powierzchniach (rzędu kilku centymetrów) prostą, tanią i szybką metodą. W moich badaniach używane były nano-kontakty wytwarzane za pomocą samoorganizacji atomów złota indukowanej temperaturowo w warunkach ultra-wysokiej próżni UHV (ciśnienie rzędu 10^{-10} mbar). Złoto, w ilości kilku warstw atomowych, nanoszone było na atomowo czyste podkłady za pomocą techniki epitaksji z wiązki molekularnej (MBE) na półprzewodniki jednoskładnikowe (Ge) oraz wieloskładnikowe (AIII-BV). W ten sposób wytworzone nano-kontakty, w formie różnych nanostruktur są zazwyczaj charakteryzowane przy użyciu technik SPM, takich jak STM czy AFM. Tego typu techniki bardzo dobrze nadają się do obrazowania morfologii powierzchni natomiast nie są one czułe na lokalne zmiany składu chemicznego (zmiany liczby atomowej) ani na strukturę wewnętrzną badanych obiektów. W mojej pracy naukowej, którą rozpocząłem po doktoracie w 2012 roku w Zakładzie Fizyki Ciała Stałego Instytutu Fizyki UJ, rozszerzyłem te standardowe badania powierzchni o badania komplementarnymi technikami mikroskopii elektronowej, które dają bezpośrednio informacje o lokalnych zmianach chemicznych (obrazowanie SEM BSE czy też analiza EDX w nanoskali) oraz o strukturze wewnętrznej badanych obiektów (SEM EBSD oraz obrazowanie HAADF STEM). Do analizy zebranych w moich badaniach danych używałem narzędzi bazujących na nowoczesnych technikach uczenia maszynowego (Machine Learning), które są w stanie dostarczyć informacje o badanym układzie w sposób niezaburzony przez człowieka. Pozwoliło mi to zbadać dogłębnie układy na poziomie atomowym oraz procesy i przemiany fazowe im towarzyszące.

Oddziaływanie atomów złota z powierzchniami półprzewodników jednoskładnikowych (Ge)

Na początku zająłem się zagadnieniami oddziaływania atomów złota w ilości kilku mono-warstw atomowych z powierzchnią Ge(001). Efekt tego oddziaływania jest bardzo ciekawy gdyż prowadzi do powstania na powierzchni Ge(001) rekonstrukcji powierzchniowej $c(8 \times 2)$ widocznej w mikroskopii STM jako pasma wzbogaconych w złoto drutów atomowych wykazujących ciekawe cechy przewodnictwa 1D tzw. płyn Tomonagi-Luttingeraⁱⁱ. Widoczny także jest efekt agregacji złota w formie wysp/klastrów 3D (Rysunek 1a)-c).



Rysunek 1: Obraz powierzchni Ge(001) po naniesieniu 6-ciu mono-warstw atomowych złota. Obraz z mikroskopu SEM przedstawiający agregacje złota w formie wysp/klastrów 3D a), widoczne są także tarasy atomowe germanu. Obraz STM przedstawiający atomowe druty na tarasach atomowych germanu wykazujące cechy przewodnictwa 1D. Obraz TEM przekroju poprzecznego uzyskanego techniką FIB pokazujący istnienie zagrzebanej pod powierzchnią warstwy wykazującej cechy przewodnictwa 2D. Rysunek zaadoptowany z pracy [H1].

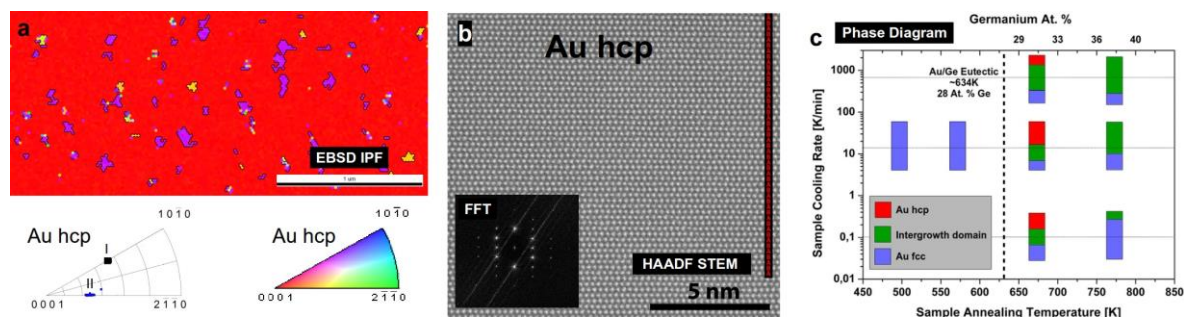
Wykonano badania lokalnego potencjału elektrochemicznego powierzchni przy użyciu potencjometrii STM wykorzystującej dwa próbki STM: jeden jako kontakt odbiorczy, drugi skanujący. Badania wykonano przy współpracy z grupą Profesora Rolfa Moellera z Uniwersytetu w Duisburgu w Niemczech. Wyniki pomiarów potencjometrycznych pokazały, że oprócz kanałów przewodnictwa typu 3D (klastry/wyspy) oraz 1D (druty atomowe) istnieje nowy ukryty kanał przewodnictwa wykazujący cechy przewodnictwa 2D [H1]. Wykonano dodatkowe badania przekrojów poprzecznych, które przygotowałem techniką FIB z próbki, za pomocą transmisyjnej mikroskopii elektronowej TEM. Badania te bezpośrednio potwierdziły istnienie nowego kanału przewodnictwa 2D w formie zagrzebanej pod powierzchnią warstwy złota Rysunek 1d) [H1].

Uzyskane wyniki przewodnictwa elektrycznego zainspirowały mnie do dalszych badań nad układem Au/Ge. Szczególnie ciekawe wydawały się badania dynamiki wzrostu wysp/klastrów 3D które mogłyby posłużyć jako dobrze zdefiniowane elektrody do podłączenia się z zewnątrz do tak ciekawego elektrycznie układu lub jako podłoże do wzrostu nano-prętów germanowych. Wykonano serię eksperymentów dla różnych temperatur samoorganizacji cienkiej warstwy 6-ciu warstw atomowych złota na powierzchni Ge(001) w warunkach UHV [H2]. Powstałe na powierzchni wyspy zbadano za pomocą wysoko rozdzielczej mikroskopii SEM pod kątem rozmiarów i kształtów. Co pozwoliło analizując wykres Arrheniusa (gęstości powierzchniowej nano-wysp w funkcji odwrotności

temperatury) wyznaczyć energię aktywacji dla dyfuzji atomów złota po powierzchni. Badania pozwoliły odkryć mechanizm procesu samoorganizacji, gdyż uzyskana wartość energii aktywacji, w granicach niepewności pomiarowych, była tożsama z energią aktywacji atomów złota po złocie. W związku z tym proces odwilżania cienkiej warstwy złota związany jest z dyfuzją atomów złota głównie po samej warstwie. Zaobserwowano dodatkowo nieciągłość w zmianie rozmiarów od temperatury związana także ze zmianą kształtu dla temperatury 360C. Aby zobrazować dokładnie ten efekt wykonano pomiary na mikroskopie TEM przekrojów poprzecznych próbek które przygotowałem techniką FIB. Wyniki jednoznacznie ukazały zagrzebanie nano-wysp w podłoże germanowe. Co jak pokazały badania związane jest z temperaturą przetopienia eutektycznego zgodną z diagramem fazowym dla układu Au-Geⁱⁱⁱ. Wynikiem badań było uzyskanie także kontroli kształtów oraz rozmiarów nano-wysp w procesie samoorganizacji w zakresie 20-100nm [H2].

Badania pokazały potencjał samoorganizacji w wytwarzaniu dobrze zdefiniowanych nano obiektów na dużych powierzchniach. Zbadałem możliwość przeniesienia tego procesu wytwarzania nano-wysp z warunków UHV do warunków bardziej zbliżonych do normalnych. W tym celu zbadałem "in situ" jak przebiega proces samoorganizacji w warunkach "słabej próżni" (ciśnienie 3mbar H₂O) za pomocą wygrzewania próbki, które przeprowadziłem bezpośrednio w mikroskopie SEM wykorzystując do tego dedykowany stolik grzewczy [H3]. Naniesiona w warunkach UHV warstwa złota na podłoże germanowe została wygrzana do temperatury 400C, przy równoczesnej akwizycji obrazów SEM w trakcie wygrzewania, umożliwiając zobaczenie na żywo jak przebiega dynamika procesu samoorganizacji. W tym wypadku proces przebiegał jednak inaczej niż w UHV. Na powierzchni zaczęły pojawiać się zagłębienia, związane z procesem trawienia germanu indukowanego metalem (Au), gdzie rozmiar zagłębienia był proporcjonalny do metalowego klastra w nim [H3]. Badania pokazały, że podczas procesu trawienia powierzchni elektrony są przenoszone z atomów Ge do metalowych klastrów Au i dalej do H₂O, co umożliwia rozrywanie wiązań Ge-Ge i w konsekwencji prowadzi do utleniania powierzchni [H3]. Badania pokazały także że w podwyższonych temperaturach wodny roztwór nie jest potrzebny do wytrawiania germanu przez nanocząstki metali. Taki proces mógłby zostać wykorzystany technologicznie jako nowa metoda tworzenia zdefiniowanych zagłębień w półprzewodnikach germanowych, która nie wymaga roztworu wodnego [H3].

Mając zbadaną dynamikę procesu samoorganizacji w UHV oraz w warunkach "słabej próżni" podjąłem się próby wyznaczenia atomowej struktury wewnętrznej oraz składu chemicznego wytworzonych nano-wysp oraz interfejsu wyspa/podłoże [H4, H7]. Na początku wykonałem pomiary dyfrakcyjne techniką EBSD dla nano-wysp powstających w warunkach UHV. Dla nano-wysp uformowanych dla temperatury wygrzewania poniżej temperatury eutektycznej dyfrakcja EBSD jednoznacznie indeksowała się jako struktura złota Au fcc (struktura kubiczna). Natomiast dla nano-wysp uformowanych powyżej tej temperatury dyfrakcja EBSD nie indeksowała się jako struktura Au fcc. Musiałem użyć innej struktury a była to struktura heksagonalna Au hcp. Pomiary dyfrakcyjne zindeksowały się bardzo dobrze jako Au hcp, co było zaskakujące gdyż złoto krystalizuje zawsze tylko w formie kubicznej Au fcc. Pomiary EBSD wykazały, że nano-wyspy mają wewnętrzną budowę typu hcp, ponadto widoczne były dwie ich populacje w sensie dwóch różnych orientacji krystalograficznych, Rysunek 2a). Z pomiarów EBSD wyznaczyłem także rozmiary krystalitów Au hcp, których rozmiar zmieniał się w zakresie 40-120nm wraz ze zmianą temperatury dla procesu samoorganizacji [H4].



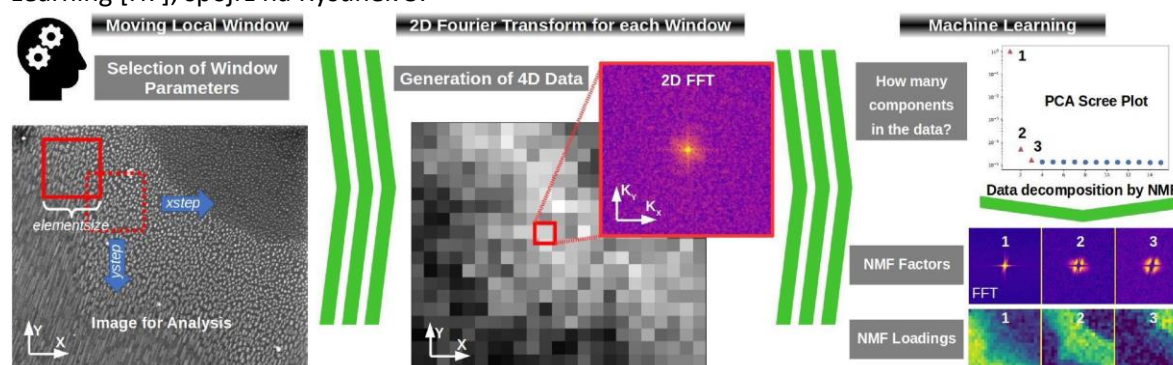
Rysunek 2: Nano-wyspy na powierzchni Ge(001) powstałe po naniesieniu 6-ciu mono-warstw atomowych złota: a) mapa IPF pokazująca rozkład przestrzenny dla nowej fazy złota Au hcp (heksagonalnej) w ramach nano-wysp - wyniki pomiarów SEM EBSD. b) obraz HAADF STEM przekroju poprzecznego z nano-wyspy ukazujący atomową strukturę Au hcp. c) uzyskany diagram fazowy pokazujący obszary występowania nowej fazy złota Au hcp. Rysunek zaadoptowany z pracy [H4].

Ciekawe i zarazem zaskakujące wyniki z pomiarów EBSD zmotywowały mnie do dalszych badań struktury wewnętrznej nano-wysp przy pomocy aktualnie jednej z najlepiej przystosowanych do tego celu technik, czyli atomowo rozdzielczej mikroskopii HAADF STEM. Badania struktury atomowej za pomocą HAADF STEM wykonane zostały w jednym z najlepszych laboratoriów mikroskopii elektronowej na świecie w laboratorium EMAT na Uniwersytecie w Antwerpii, Belgia w grupie Prof. Jo Verbeeck-a. Badania sfinansował mój projekt (20141212-Jany EU Grant Agreement 312483) w ramach uzyskanego grantu z projektu europejskiego ESTEEM2 (Integrated Infrastructure Initiative–I3). Pomiary HAADF STEM z przekrojów poprzecznych nano-wysp ukazały po raz pierwszy atomową strukturę wewnętrzną obiektów. Od podłoża germanowego wyrastała faza złota Au fcc na górze której zawsze rosnęło Au hcp, patrz Rysunek 2b), potwierdzając tym samym wyniki pomiarów EBSD, gdyż sygnał EBSD pochodzi z kilku nanometrów od powierzchni próbki (od góry). Dodatkowe badania składu chemicznego za pomocą techniki STEM EELS potwierdziły, że mamy do czynienia rzeczywiście z czystym złotem a nie stopem Au/Ge. Ponadto zbadano także wiodący interfejs złoto-german, który rozciągał się na odległość ~ 2 nm od nano-wyspy, nie zaobserwowano mieszania się atomów Au z atomami Ge w kolumnach atomowych, co potwierdziło zgodność z diagramami fazowymi Au-Ge. Wyniki eksperymentalne pozwoliły zaproponować mechanizm formowania się nowej fazy złota Au hcp w procesie samoorganizacji na powierzchni składający się z kilku następujących po sobie etapów [H4]:

1. agregacja Au spowodowana dyfuzją powierzchniową i tworzeniem się kropelek cieczy Au/Ge. Trawienie podłoża germanu oraz tworzenie wgłębień piramidalnych;
2. rekrytalizacja Au z cieczy podczas chłodzenia do fazy fcc z jednoczesnym wzrostem stężenia Ge w pozostałej cieczy;
3. tworzenie się stopu β AuGe o strukturze hcp;
4. tworzenie się fazy Au hcp z rozpadu stopu β AuGe hcp przy temperaturze próbki ~ 463 K.

Owoce i zarazem ukoronowaniem tych badań było wyznaczenie diagramu fazowego pokazującego obszary występowania nowej fazy złota Au hcp w zależności od temperatury samoorganizacji, która miała wpływ na koncentrację germanu w cieczy Au/Ge po przetopieniu, oraz od tempa chłodzenia próbki, patrz Rysunek 2c) [H4]. Podsumowując, po raz pierwszy udało się wysyntetyzować nową stabilną fazę złota Au hcp w formie nano-wysp/klastrów 3D oraz wyznaczyć dla niej parametry sieci, z analizy obrazów HAADF STEM. Wyznaczone parametry sieci zdeponowano w formie pliku CIF w ogólnodostępnej dla środowiska naukowego darmowej bazie danych struktur krystalograficznych COD^{iv}.

Wyznaczenie diagramu fazowego, zawartości złota hcp względem fcc, wymagało analizy wielu atomowych obrazów HAADF STEM nano-wysp dla różnych parametrów procesu samoorganizacji. Ze względu na podobieństwo struktury atomowej złota fcc i hcp, różniące się sekwencją ułożenia płaszczyzn atomowych (złoto fcc sekwencja ABCABC, złoto hcp ABABAB) analiza obrazów (składu fazowego) musiała zostać przeprowadzona ręcznie, aby prawidłowo wyznaczyć i odróżnić obie te struktury. Był to bardzo długi i żmudny etap badań. Aby w przyszłości uprościć i zautomatyzować ten etap analizy opracowałem automatyczną metodę analizy obrazów mikroskopowych bazującą na technice lokalnej transformaty Fouriera za pomocą ruchomego okna oraz metodach Machine Learning [H7], spójrz na Rysunek 3.



Rysunek 3: Graficzne przedstawienie mojej idei automatycznej analizy obrazów mikroskopowych. Ruchome lokalne okno porusza się po obrazie, dla każdego okna wyliczana jest dwuwymiarowa transformata Fouriera, w wyniku czego tworzony jest zestaw danych 4D. Później dane są przetwarzane za pomocą Machine Learning: w celu określenia liczby składników/frakcji w danych, przeprowadzana jest analiza PCA generująca tzw. Scree Plot; następnie, dane są rozłożone “na ślepo” na interpretowalne składniki za pomocą dekompozycji macierzowej NMF. Lokalne cechy obrazu są wykrywane automatycznie. Rysunek zaadoptowany z pracy [H7].

Idee opracowanej przeze mnie metody można przedstawić po krótku w kilku etapach:

1. Ruchome lokalne okno, o zdefiniowanym rozmiarze, porusza się po obrazie mikroskopowym, dla każdego okna wyliczana jest dwuwymiarowa transformata Fouriera (2D FFT). W wyniku czego tworzony jest zestaw danych czterowymiarowych (4D) tzn. dwa wymiary przestrzenne (x, y na obrazie mikroskopowym) oraz dwa wymiary w przestrzeni Fouriera (K_x, K_y).
2. Wytworzone dane 4D są przetwarzane za pomocą Machine Learning. W celu określenia składników/frakcji w danych budowany jest wykres “Scree Plot” (procent wariacji w funkcji ilości komponent) dla Principal Component Analysis (PCA) z danych. Ilość komponent w danych jest wyznaczana automatycznie z wykresu “Scree Plot” jako punkt przegięcia krzywej.
3. Następnie, dane są rozłożone “na ślepo” na interpretowalne składniki, gdzie ilość składników określona jest z analizy “PCA Scree Plot”, za pomocą dekompozycji macierzowej non-Negative Matrix Factorization (NMF). Lokalne cechy obrazu są wykrywane automatycznie.

Jak pokazałem w [H7], opracowana metoda automatycznej analizy obrazów mikroskopowych bez problemu jest w stanie wyznaczyć, w całkowicie automatyczny sposób, obszary występowania złota fcc oraz hcp z obrazu HAADF STEM, co jest niezbędne do zbudowania wykresu fazowego.

Opracowaną metodę w formie programu komputerowego zdeponowałem w darmowym ogólnodostępnym repozytorium Mendeleev Data^v. Warty nadmienia jest fakt, iż moja metoda może być z sukcesem użyta do wielu różnych typów obrazów mikroskopowych oraz cieszy się ona

uznaniem środowiska mikroskopowego. Program został pobrany ponad 290 razy, praca [H7] opublikowana w czasopiśmie Micron na chwilę obecną uzyskała już 14 cytowań (Scopus).

Moje badania samoorganizacji złota na powierzchni germanu zostały sfinansowane z dwóch grantów K/DSC/002042/2014 (w ramach MNiSzW Nr 7150/E-338/M/2014) oraz K/DSC/003656/2016 (w ramach MNiSzW Nr 7150/E-338/M/2016), w których byłem kierownikiem.

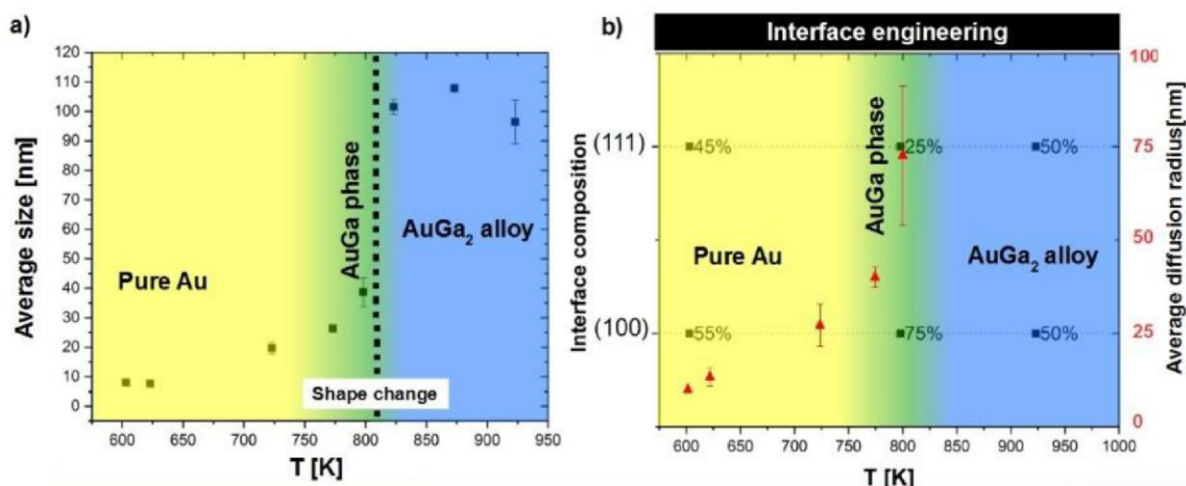
Oddziaływanie atomów złota z powierzchniami półprzewodników wieloskładnikowych (AIII-BV)

Po sukcesie badań nad samoorganizacją złota na powierzchni germanu, moje badania rozszerzyłem na układy wieloskładnikowe z grupy półprzewodników AIII-BV takich jak InSb, InAs, InP, GaSb, GaAs, GaP. Półprzewodniki AIII-BV ze względu na swoje wyjątkowe właściwości, takie jak wysoka ruchliwość nośników oraz bezpośrednio pasmo zabronione, są uważane za obiecujące materiały dla nowej generacji nano-urządzeń elektronicznych^{vi}. Niedawno opracowane technologie, takie jak TASE przez grupę z IBM Zurich^{vii} oraz ELO^{viii} do integracji półprzewodników AIII-BV z krzemem w nanoskali dają możliwość na rozszerzenie obecnej konwencjonalnej technologii opartej na krzemie o wytwarzanie nano-urządzeń AIII-BV/Si, co czyni aktualnie półprzewodniki AIII-BV wyjątkowo atrakcyjne. Do wszystkich tych aplikacji potrzebne są dobrze zdefiniowane nano-elektrody mogące połączyć układy ze światłem zewnętrznym. Ponadto, w ostatnich latach w przemyśle nano-elektronicznym stojące druty półprzewodnikowe AIII-BV cieszą się dużym zainteresowaniem przy wytwarzaniu nowych urządzeń elektronicznych^{ix}. Takie druty są hodowane przy użyciu nano-klastrów metali, głównie złota jako katalizatora w procesie wzrostu VLS. Samoorganizacja atomów złota na powierzchniach półprzewodników AIII-BV może bez problemu, w szybki i tani sposób, takie dobrze zdefiniowane nano-elektrody/klastry dostarczyć [H5, H6, H8].

Na początku zająłem się zbadaniem procesu samoorganizacji złota na powierzchni arsenku galu GaAs(001) [H6]. Sam arsenek galu jest wyjątkowo ciekawym materiałem jeśli chodzi o zastosowania m.i. ze względu na fakt odkrycia 1962 roku przez Marshall-a i współpracowników stymulowanej emisji światła ze złącza P-N zbudowanego z GaAs^x. Badania pokazały, że proces samoorganizacji 2ML złota na powierzchni kryształu arsenku galu prowadzi do powstania metalicznych nanostruktur o różnych morfologiach (prostokątne/kwadratowe nanoklastry, nanostruktury ośmiokątne) i rozmiarach (10-100nm) w zależności od temperatury procesu samoorganizacji [H6].

Przeprowadziłem statystyczną analizę parametrów morfologicznych wytworzonych nanostruktur, która wykazała istnienie dwóch grup nanostruktur wytworzonych powyżej i poniżej temperatury ~800K. Aby wyjaśnić te różnice wykonano pomiary, przekrojów poprzecznych nanostruktur, które wykonałem za pomocą techniki FIB, na skaningowym transmisyjnym mikroskopie elektronowym STEM w Międzynarodowe Centrum Mikroskopii Elektronowej dla Inżynierii Materiałowej AGH w Krakowie. Pomiary pozwoliły zbadać skład chemiczny powstałych nanostruktur za pomocą techniki EDX oraz zobaczyć ich atomową strukturę wewnętrzną wraz z interfejsem nanostruktura/podkład. Aby odwickać sygnał EDX pochodzący od nanostruktur wykorzystałem techniki analizy bazujące na Machine Learning. Umożliwiło to wyznaczenie składu fazowego nanostruktur w zależności od temperatury samoorganizacji. Zaobserwowany efekt zmian morfologii nanostruktur wraz z temperaturą samoorganizacji, uwidoczniony w analizie statystycznej, został powiązany ze zmianą składu fazowego nanostruktur, zaobserwowano ewolucję fazową związaną ze zmianą morfologii: faza Au, AuGa (struktury kwadratowe/prostokątne, temperatura poniżej ~800K), faza AuGa₂ (struktury ośmiokątne, temperatura powyżej ~800K). Badania pokazały także, że ewolucja ta jest konsekwencją efektywności uwalniania galu z arsenku galu na powierzchni. Stosując konwencjonalną teorię nukleacji udało się także wyznaczyć energię aktywacji dla dyfuzji atomów

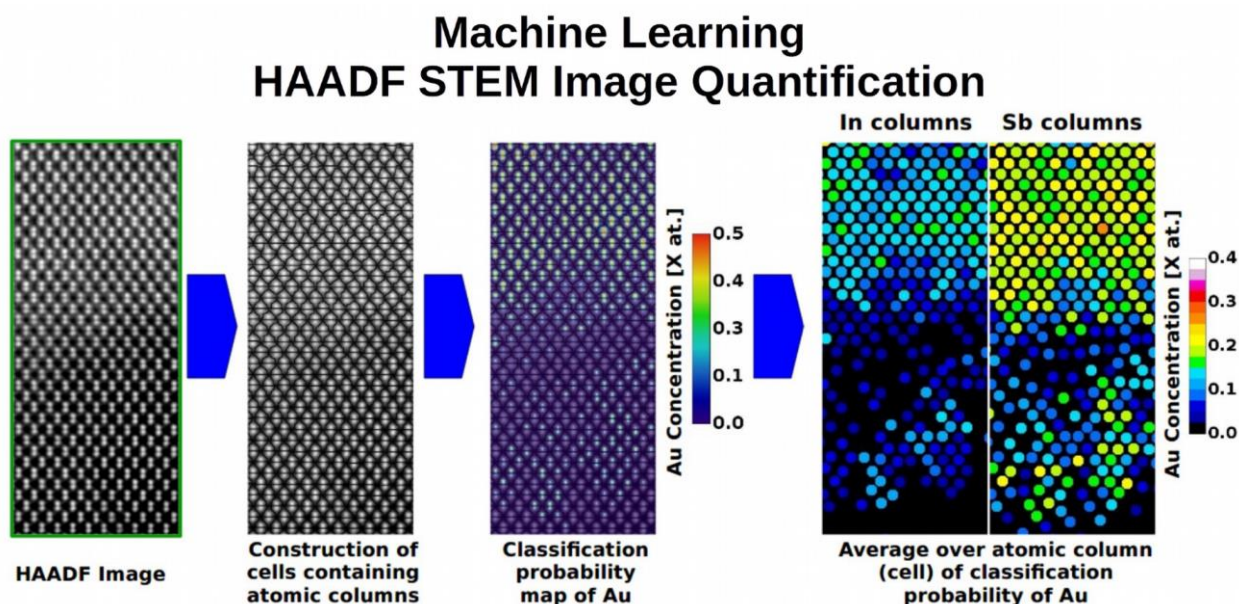
złota po zrekonstruowanej powierzchni arsenku galu oraz krytyczny rozmiar klastra składającego się tutaj z trzech atomów złota. Finalnym wynikiem tych badań było wyznaczenie diagramów fazowych dla nanostruktur oraz kompozycji interfejsu nanostruktura/podłoże (Rysunek 4), co pokazało że można w kontrolowany sposób sterować fazą oraz interfejsem nanostruktur poprzez odpowiedni dobór temperatury samoorganizacji [H6].



Rysunek 4: Diagramy fazowe ukazujące możliwości sterowania fazą oraz interfejsem dla procesu samoorganizacji złota na powierzchni GaAs(001). Średni rozmiar nanostruktur oraz faza w zależności od temperatury samoorganizacji a). Kompozycja interfejsu oraz średni promień dyfuzji wraz z fazą nanostruktur w zależności od temperatury samoorganizacji. Rysunek zaadoptowany z pracy [H6].

Wyjątkowo interesujące wyniki dla układu Au/GaAs zmotywowały mnie do rozszerzenia badań o kolejne półprzewodniki z grupy AIII-BV. Podjąłem się próby usystematyzowania oddziaływania atomów z powierzchnią półprzewodników AIII-BV [H8]. W tym celu wybrałem trzy półprzewodniki Indowe (InSb, InAs, InP) oraz odpowiednio trzy Galowe (GaSb, GaAs, GaP) o orientacji powierzchni (001). Aby zbadać czysty wpływ oddziaływania atomów złota, bez ingerencji z dodatkowymi zaburzającymi składnikami, badania przeprowadzono w warunkach UHV (ciśnienie $\sim 10^{-10}$ mbar), co gwarantuje maksymalną czystość jaka obecnie jest dostępna eksperymentalnie. Powierzchnie odpowiednio przygotowano, poprzez preparatykę bombardowania jonowego oraz wygrzewania w UHV uzyskano atomowy porządek na powierzchni, co potwierdzono pomiarami dyfrakcyjnymi powierzchni RHEED. Na tak przygotowane powierzchnie nanoszone było złoto w ilości dwóch mono-warstw atomowych w temperaturze 330C, zawsze tak samo dla każdej próbki. Precyzyjna kontrola warunków eksperymentalnych (m.i. temperatury powierzchni za pomocą pirometru) pozwoliła wyrugować wszystkie zaburzające czynniki. W wyniku procesu samoorganizacji indukowanego temperaturowo na powierzchni uzyskano nanostruktury wzbogacone w złoto, będące konsekwencją oddziaływania atomów złota, jak pokazały te badania [H8]. W systematyczny sposób zbadano te nanostruktury. Najpierw wykonano pomiary morfologii za pomocą mikroskopii SEM oraz AFM. Następnie zbadano strukturę wewnętrzną nanostruktur, wykorzystując do tego celu atomowo rozdzielczą mikroskopie HAADF STEM oraz spektroskopie STEM EDX. Pomiary przekrojów poprzecznych nanostruktur, które wykonałem za pomocą techniki FIB, na skaningowym transmisyjnym mikroskopie elektronowym STEM wykonano w Międzynarodowym Centrum Mikroskopii Elektronowej dla Inżynierii Materiałowej AGH w Krakowie. Wykonane pomiary STEM umożliwiły identyfikację fazową powstałych nanostruktur. Wyznaczono także atomowy interfejs nanostruktura/podłoże dla każdego z sześciu układów. Jedynie dla układu Au/InSb, gdzie nanostruktury miały charakter drutów zbudowanych ze stopu AuIn₂, zaobserwowano obszar dyfuzji

atomów złota do matrycy/podkładu InSb. Aby ilościowo eksperymentalnie opisać efekt dyfuzji atomów złota do sieci atomowej InSb podjąłem się kwantyfikacji atomowego obrazu HAADF STEM, wykorzystując fakt iż intensywność sygnału HAADF STEM jest proporcjonalna do liczby atomowej Z oraz grubości próbki. Opracowałem metodę bazującą na technikach Machine Learning, która jest w stanie przypisać każdej kolumnie atomowej InSb odpowiednią ilość (procent atomowy) wbudowanego do niej złota. W tym celu wykorzystałem klasyfikację metodą Machine Learning Random Forest, Idea metody przedstawiona jest na Rysunku 5.



Rysunek 5: Idea kwantyfikacji obrazu HAADF STEM za pomocą Machine Learning. Obraz HAADF STEM na początku dzielony jest na cele zawierające kolumny atomowe, następnie kolumny atomowe (cele) są klasyfikowane za pomocą techniki Machine Learning Radom Forest. W procesie klasyfikacji kolumn atomowych wykorzystywane są eksperymentalne wzorce dla kolumn atomowych złota oraz kolumn In-Sb. Zakładając stałą grubość próbki w badanym obszarze, prawdopodobieństwo klasyfikacji złota jest tożsame z atomową koncentracją złota w kolumnie. W ten sposób uzyskuje się koncentrację atomową w kolumnie atomowej antymonu (Sb) oraz indu (In). Rysunek zaadoptowany z pracy [H8].

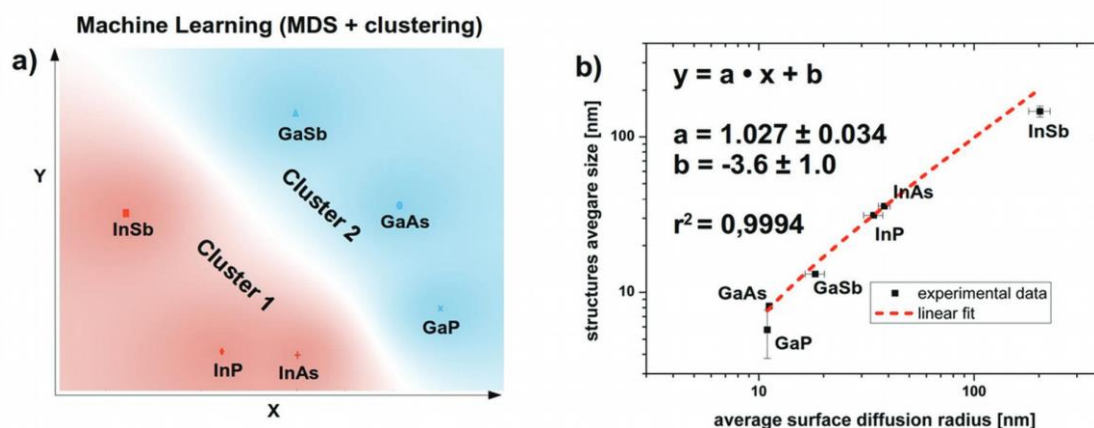
Moją metodę można podsumować w kilku krokach:

- Na początku obraz HAADF STEM jest dzielony na cele/komórki zawierające kolumny atomowe
- Następnie, kolumny atomowe (cele) są klasyfikowane za pomocą techniki Machine Learning Random Forest. W procesie klasyfikacji kolumn atomowych wykorzystywane są eksperymentalne wzorce intensywności dla czystych kolumn złota oraz kolumn Indu i Antymonu.
- Zakładając stałą grubość próbki w badanym obszarze, zmiany sygnału proporcjonalne są wtedy tylko do liczby atomowej oraz fakt iż prawdopodobieństwo klasyfikacji kolumn Au oraz In-Sb musi się sumować do wartości 1, wtedy prawdopodobieństwo klasyfikacji złota jest tożsame z koncentracją atomową złota.

W powyższy sposób uzyskałem koncentracje atomową złota w kolumnach atomowych antymonu (Sb) oraz indu (In). Obszar dyfuzji złota do sieci InSb został z sukcesem ilościowo opisany [H8]. Pozwoliło to zauważyć niejednorodności w wbudowywaniu się atomów złota w sieć atomową InSb, podsieć atomów antymonu była znacznie bardziej populowana w złoto niż podsieć indu. Wyniki te

zostały potwierdzone teoretycznie za pomocą zaawansowanych obliczeń teorii funkcjonału gęstości (DFT) uwzględniających także efekty temperatury [H8].

Zebrane dane z pomiarów zarówno morfologii powierzchni jak i kompozycji fazowej, tworzące wielowymiarową przestrzeń parametrów opisującą badane układy Au/AIII-BV poddałem analizie Machine Learning, wykorzystując techniki MDS^{xi} oraz K-Means^{xii}, aby w sposób niezależny od człowieka znaleźć relacje między parametrami. Zidentyfikowano automatycznie dwie grupy (klastry) o podobnych własnościach. Co w wyniku pokazało, że półprzewodniki Galowe w inny sposób reagują ze złotem niż Indowe, jest to związane z różną stabilnością półprzewodników AIII-BV podczas kontaktu ze złotem, Rysunek 6a.



Rysunek 6: Wynik analizy Machine Learning parametrów powstałych nanostruktur a). Zidentyfikowano dwie grupy (klastry). Średni rozmiar powstałych nanostruktur w funkcji średniego promienia dyfuzji powierzchniowej b). Rysunek zaadoptowany z pracy [H8].

Badania pokazały także że proces oddziaływania złota z powierzchniami AIII-BV indukuje zrywanie wiązań chemicznych pomiędzy metalem AIII a elementem BV, co w konsekwencji prowadzi do uwolnienia się na powierzchni mobilnych atomów metalu AIII które wraz z atomami złota agregują budując nanostruktury wzbogacone w złoto. Jak pokazały badania, mimo iż mamy tutaj do czynienia z oddziaływaniem chemicznym między składnikami to ciągle rozmiar powstałych nanostruktur jest silnie skorelowany z średnim promieniem dyfuzji powierzchniowej, Rysunek 6b. Wskazuje to, że niezależnie od mechanizmu oddziaływania chemicznego między półprzewodnikami AIII-BV a złotem, nanostruktury powstają głównie w wyniku powierzchniowej dyfuzji adatomów i ich nukleacji.

Pomiary pozwoliły także w sposób jednoznaczny wyznaczyć reakcję chemiczną odpowiedzialną za dostarczanie atomów metalu AIII do budowania nanostruktur na powierzchni. Wyznaczono także ilość atomów złota potrzebną do uwolnienia jednego metalicznego atomu AIII, mówiącą o efektywności reakcji, Tabela 1.

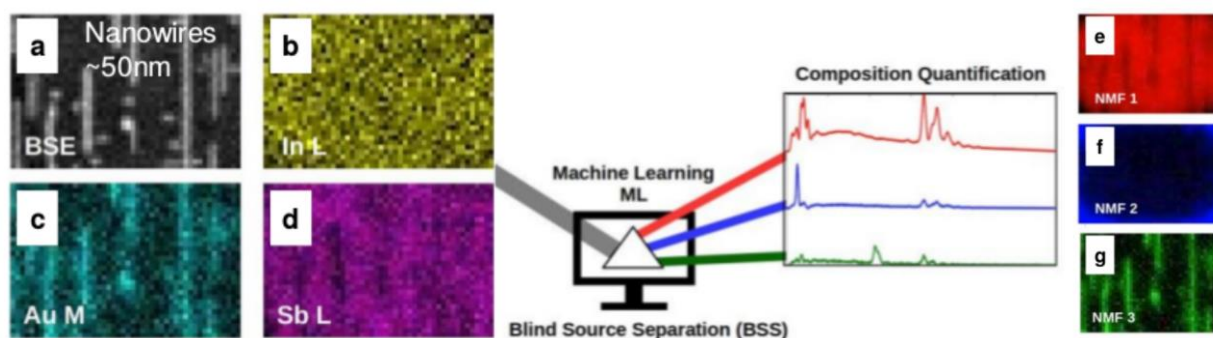
Z przeprowadzonych badań wyłonił się pełny i kompletny obraz oddziaływania atomów złota z powierzchniami AIII-BV na poziomie atomowym [H8].

Jak pokazałem powyżej do badań nad oddziaływaniem złota kluczowa jest identyfikacja składu chemicznego oraz fazy w nanoskali. Aktualnie jedyną dostępną lokalną metodą mogącą dostarczyć tej informacji jest Transmisyjna Mikroskopia Elektronowa (TEM) oraz techniki jej towarzyszące jak EDX, EELS czy też obrazowanie HAADF STEM. Do badań TEM wymagana jest natomiast specjalna preparatyka próbek w formie cienkiej folii "lamelli" często przygotowywanej za pomocą zfokusowanej wiązki jonowej (FIB). Zarówno pomiary TEM jak i sama preparatyka FIB wymagają bardzo wiele czasu, poza tym są to bardzo kosztowne techniki.

Badany układ	Zidentyfikowana reakcja chemiczna	Ilość atomów złota potrzebna do uwolnienia jednego metalicznego atomu AIII
2ML Au na InSb(001)	$Au + 2InSb \rightarrow AuIn_2 + 2Sb\uparrow$	0.5
2ML Au na InAs(001)	$3Au + InAs \rightarrow InAu_3 + As\uparrow$	3
2ML Au na InP(001)	$Au + 2InP \rightarrow AuIn_2 + 2P\uparrow$	0.5
2ML Au na GaSb(001)	$Au + 2GaSb \rightarrow AuGa_2 + 2Sb\uparrow$	0.5
2ML Au na GaAs(001)	$2.5Au + GaAs \rightarrow 2.5Au + Ga + As\uparrow$	2.5(0.4)
2ML Au na GaP(001)	$5.9Au + GaP \rightarrow 5.9Au + Ga + P\uparrow$	5.9(0.34)

Tabela 1: Zidentyfikowana reakcja chemiczna prowadząca do powstania na powierzchni kryształu AIII-BV wzbogaconych z złoto nanostruktur w temperaturze 330C. Tabela zaadoptowana z pracy [H8].

Ogranicza to ilościową stosowalność tych technik do każdej próbki. Dość powszechną i dostępną techniką stosowaną w wielu laboratoriach do charakteryzacji powierzchni w skali nano jest Skaningowa Mikroskopia Elektronowa (SEM). Często mikroskop SEM jest wyposażony także w detektor EDX do pomiarów składu chemicznego w mikroobszarach. Jak pokazałem, można z sukcesem użyć techniki SEM EDX wraz z obróbką Machine Learning do charakteryzacji składu chemicznego z nanostruktur [H5]. Jak powszechnie wiadomo, obszar oddziaływania wiązki elektronowej z materia, tutaj generacji charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego, ogranicza rozdzielczość dla pomiarów SEM EDX. Optymalizacja rozkładu głębokości promieniowania rentgenowskiego i przestrzennego rozkładu radialnego poprzez dostosowanie energii i wielkości wiązki elektronów (prąd wiązki) prowadzi do uzyskania map rentgenowskich o wysokiej rozdzielczości przestrzennej w nanoskali. Jednakże analiza ilościowa tak zebranych danych SEM EDX z nanostruktur jest trudna ze względu na mieszanie się sygnałów z różnych głębokości próbki. Jak pokazałem, można z sukcesem rozwiązać ten problem mieszania się sygnałów poprzez zastosowanie do danych SEM EDX jednej z technik Machine Learning tzw. ślepej separacji sygnałów (BSS) w formie dekompozycji macierzowej non-Negative Matrix Factorization (NMF) [H5]. Dane EDX są dekomponowane, w sposób niezależny od człowieka, na czyste niez mieszane sygnały EDX oraz odpowiadające im mapy przestrzenne. Ilość komponent na które metoda NMF ma rozłożyć dane uzyskiwana jest z wcześniejszej analizy PCA "scree plot". Tak rozłożone dane na czyste sygnały pochodzące z nanostruktur oraz z podłoża mogą zostać poddane standardowej kwantyfikacji SEM EDX za pomocą metody ZAF. Co finalnie skutkuje uzyskaniem ilościowego składu chemicznego nanostruktur. Jak pokazałem i zweryfikowałem to w pracy [H5] moja metoda bez problemu jest w stanie odzyskać skład chemiczny z nanodrutów zbudowanych ze stopu AuIn₂ na antymonku indu (InSb), Rysunek 7.



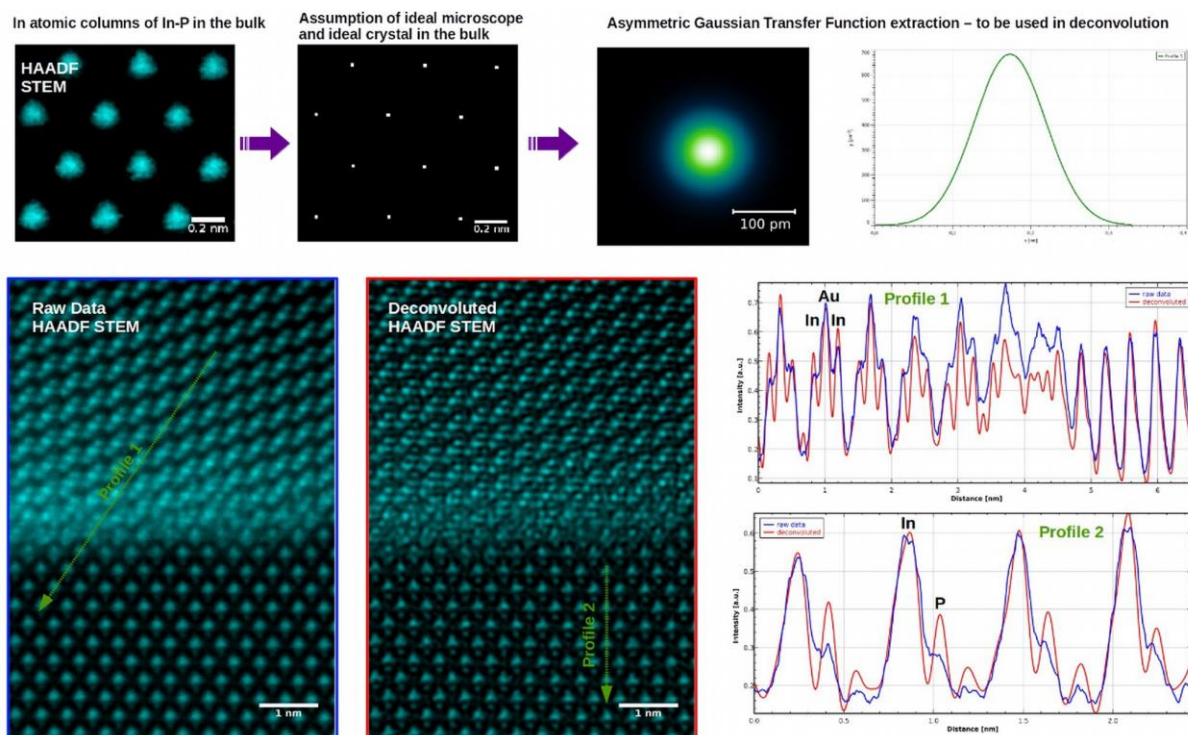
Rysunek 7: Przykład ilościowej analizy składu chemicznego nanodrutów AuIn₂ na InSb. Wyniki

pomiarów SEM EDX w nanoskali: obraz BSE a), mapa Indu b), mapa złota c), mapa antymonu d). Wynik dekompozycji danych SEM EDX na czyste sygnały: podkład InSb e), tło f), nanodruty g). Rysunek zaadaptowany z pracy [H5].

Metoda ślepej separacji źródeł (BSS) za pomocą NMF danych SEM EDX w nanoskali może być z powodzeniem stosowana do wyznaczania ilościowego składu chemicznego z nanoobiektów. Daje to unikalną możliwość zastosowania prostych i dostępnych powszechnie pomiarów SEM EDX, w porównaniu z czasochłonnymi i kosztownymi pomiarami TEM, w celu uzyskania rzeczywistej kwantyfikacji chemicznej w nanoskali. Metodę tą można zastosować dla wielu nanosystemów (m.i. AIII-BV), w których potrzebna jest kwantyfikacja chemiczna, znacznie przyspieszając pomiary i zmniejszając koszty [H5].

Scharakteryzowane chemicznie i strukturalnie nano-układy Au/AIII-BV mają swoje potencjalne zastosowanie jako złącza metal-półprzewodnik (M-S). Złącze metal-półprzewodnik (M-S) jest jednym z najstarszych układów elektronicznych do dziś bardzo powszechnie i chętnie stosowanym w prawie wszystkich urządzeniach elektronicznych jako elektroda. Kontrola i zrozumienie własności takiego złącza jest kluczowe do prawidłowego i optymalnego funkcjonowania całego urządzenia. Charakter takiego złącza (Omowy, Schottky-iego) zależy od własności użytego metalu oraz półprzewodnika. Złącza tego typu charakteryzuje się często w efektywny sposób wyznaczając jego rezystancje (złącze Omowe) lub barierę Schottky-ego (złącze Schottky-ego). Natomiast charakter takiego złącza zależy nie tylko od "globalnych" własności, ale także od tego co dzieje się lokalnie na samym interfejsie atomowym. Podjąłem się próby lokalnej charakteryzacji na poziomie atomowym nano-złącza M-S [H9]. Jako nano-złącze M-S został użyty układ Au/InP, gdzie podczas procesu samoorganizacji 2ML Au na powierzchni InP(001) formują się nano-elektrody (średnica ~20-30nm) zbudowane ze stopu AuIn₂. Samo InP jest ciekawe ze względu na swoje zastosowanie w aplikacjach optoelektronicznych^{xiii} oraz ostatnio jako biosensor bazujący na tranzystorze polowym (FET)^{xiv}. Do charakteryzacji nano-złącza M-S zostały użyte pomiary Conductive AFM (C-AFM) w warunkach UHV. Dane zbierano w trybie hiperspektralnym tzn. Dla każdej pozycji na próbce x,y oprócz wysokości z, rejestrowany był także sygnał zależności prądu od przyłożonego napięcia w formie krzywej I-V. Kompletny pomiar zawierał około ~7200 krzywych zmierzonych krzywych I-V. Tego typu dane poddałem analizie typu Machine Learning, gdzie użyty algorytm K-Means w sposób automatyczny pogrupował dane w trzy grupy w zależności od charakteru krzywej I-V. Dzięki temu udało się zaobserwować i scharakteryzować elektrycznie, w formie średniej reprezentatywnej krzywej I-V, dwa typy nano-elektrod t.j. elektrody o wysokiej przewodności (liniowa zależność I-V) oraz elektrody o niskiej przewodności (nieliniowa zależność I-V) [H9]. Następnie użyto pomiarów HAADF STEM przekrojów poprzecznych nano-elektrod, aby scharakteryzować lokalnie atomowy interfejs. Pomiary przekrojów poprzecznych, które przygotowałem za pomocą techniki FIB, wykonano na skaningowym transmisyjnym mikroskopie elektronowym STEM w Międzynarodowym Centrum Mikroskopii Elektronowej dla Inżynierii Materiałowej AGH w Krakowie. Aby dokładniej zobaczyć atomową strukturę interfejsu i zwiększyć rozdzielczość uzyskanych obrazów atomowych HAADF STEM, opracowałem i wykonałem dekonwolucje obrazów atomowych. Dekonwolucja bazowała na zaproponowanym przeze mnie założeniu idealnej struktury atomowej w głębi próbki (w "bulku") oraz założeniu idealnego mikroskopu tzn. w idealnym mikroskopie idealna struktura atomowa powinna być widoczna jako punkty. Korzystając z mojego założenia wyznaczyłem funkcje transferu oraz dokonałem pełnej dekonwolucji obrazów, Rysunek 8. Wartym nadmienia jest fakt, że cały proces dekonwolucji, bazujący na moim pomysśle, był przeprowadzony w darmowym

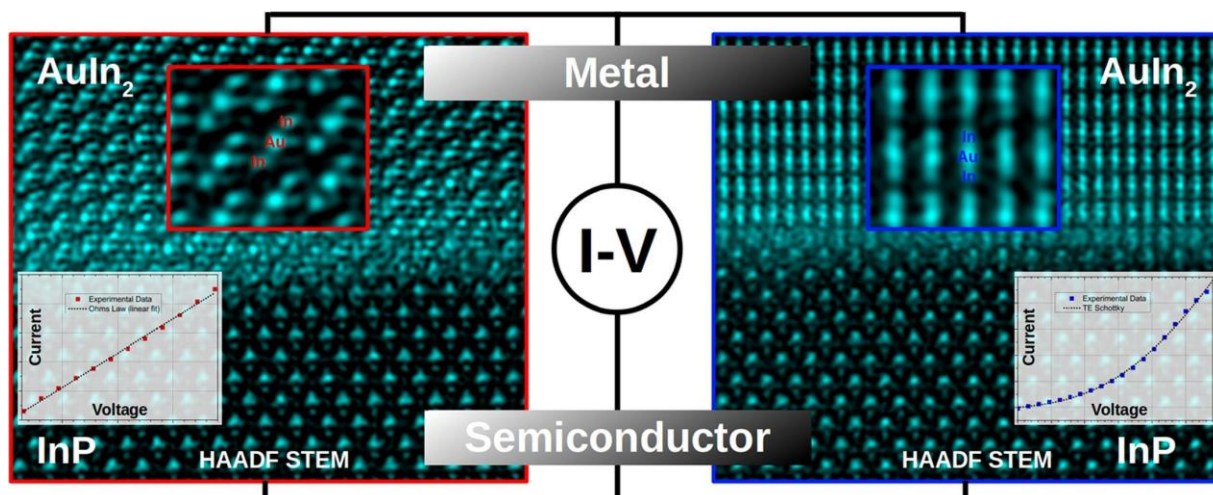
oprogramowaniu Gwyddion (<http://gwyddion.net/>), tym samym jest on dostępny dla całego środowiska naukowego.



Rysunek 8: Idea dekonwolucji obrazu HAADF STEM bazująca na założeniu idealnej sieci oraz idealnego mikroskopu (górny rząd). Porównanie obrazów przed i po dekonwolucji wraz w przekrojami liniowymi przez kolumny atomowe (dolny rząd) dla interfejsu AuIn₂/InP. Widać, że kolumny atomowe są znacznie wyraźniej widoczne, rozdzielczość jest zwiększona. Jak widzimy, użycie dekonwolucji nie wprowadza żadnych artefaktów, zwiększa się rozdzielczość obrazu, co ułatwia interpretację struktury. Rysunek zaadoptowany z pracy [H9].

Obrazowanie atomowe HAADF STEM umożliwiło zobaczenie atomowego interfejsu dla obu typów nanoelektrod z czułością chemiczną. Dane HAADF STEM zostały użyte do konstrukcji atomowych modeli strukturalnych a następnie do obliczeń DFT (Density Functional Theory) lokalnej struktury elektronowej interfejsu w formie LDOS (Local Density of States). Co przyczyniło się do zrozumienia działania oraz interpretacji danych I-V dla obu nano-złączy M-S.

Pomiary pokazały, że na InP mamy dwa typy nano-elektrod, zbudowanych z tej samej fazy tzn. stopu AuIn₂, o różnym przewodnictwie (Omowy, Schottky-ego), różniące się jedynie orientacją krystalograficzną. Mamy więc takie same własności "globalne" obu złączy M-S (taki sam materiał AuIn₂ oraz InP), różnice są jedynie "lokalne" związane z inną orientacją krystalograficzną a co za tym idzie z innym interfejsem atomowym. Co bezpośrednio przekłada się na inne własności elektryczne obu złączy związane ze zmianą pozycji krawędzi pasma przewodnictwa InP na interfejsie oraz ze zmianą poziomu Fermiego, jak to pokazały obliczenia DFT [H9].



Rysunek 9: Obrazy HAADF STEM atomowego interfejsu AuIn₂/InP, wraz z wynikami pomiarów I-V wykonanych za pomocą C-AFM dla nanoelektrod o przewodnictwie Omowym (lewa strona) oraz o przewodnictwie Schottky-ego (prawa strona). Rysunek zaadaptowany z pracy [H9].

Finalnie badania, które koordynowałem, pokazały że efekt orientacji krystalograficznej metalowej nano-elektrody w stosunku do podłoża, można wykorzystać do kontrolowania właściwości elektrycznych urządzeń opartych na złączu M-S, wykorzystując tylko pojedynczą fazę metal/stop do zmiany między reżimami przewodnictwa Omowy-Schottky-ego. Tego typu efekty mogą mieć również zastosowanie do innych systemów metal-półprzewodnik. Daje to możliwość projektowania nowych przyszłych urządzeń elektronicznych z wykorzystaniem elektrod metalowych o określonej, optymalnie dopasowanej orientacji krystalograficznej, w szczególności w obszarze urządzeń opartych na półprzewodnikach AIII-BV.

Moje badania samoorganizacji złota na powierzchni półprzewodników z grupy AIII-BV zostały sfinansowane z grantu K/DSC/004340/2017 (w ramach MNiSzW Nr 7150/E-338/M/2017), w którym byłem kierownikiem.

Podsumowanie

Techniki mikroskopii elektronowej wraz z nowoczesną analizą zebranych danych za pomocą Machine Learning, pozwoliły mi zbadać oddziaływanie atomów złota oraz przemiany fazowe na powierzchniach półprzewodników jedno (Ge) i wieloskładnikowych (AIII-BV). Ze względu na zastosowanie technik czułych na zmianę składu chemicznego oraz fazy, takich jak spektroskopia EDX, dyfrakcja EBSD czy też obrazowanie HAADF STEM, możliwe było zaobserwowanie i rzetelne scharakteryzowanie po raz pierwszy przemian fazowych na powierzchniach półprzewodnikowych będących wynikiem oddziaływania atomów złota. Po raz pierwszy wyznaczono diagramy fazowe dla wielu układów. Zaobserwowano i opisano pojawianie się nowej heksagonalnej formy złota Au hcp w procesie samoorganizacji na powierzchni germanu. Dzięki temu, udało się scharakteryzować skomplikowaną ze względu na reaktywność chemiczną naturę oddziaływania złota z powierzchniami wieloskładnikowymi AIII-BV. Zidentyfikowano finalnie reakcje chemiczne na powierzchniach półprzewodnikowych kontrybuujące do formowania się nanostruktur. Dokonano także dogłębnej analizy powstałego nano-złącza metal-półprzewodnik. Wiele z tych wyników uzyskano dzięki nowym

pomysłom analizie danych bazujących na technikach Machine Learning. Badania pokazały, iż można z sukcesem użyć tych technik do analize wielu problemów związanych z badaniem nanoukładów. Z przeprowadzonych badań wyłonił się nowy, kompletny i całościowy obraz oddziaływania złota z powierzchniami półprzewodnikowymi w skali atomowej.

5. Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.

W czasie studiów doktoranckich na Uniwersytecie Jagiellońskim w Krakowie wyjechałem na okres 3-let (2006-2009) do IKP Forschungszentrum-Juelich, Niemcy w celu realizacji badań naukowych niezbędnych do doktoratu¹. Z tego okresu pochodzą następujące publikacje z moją afiliacją naukową jako "Forschungszentrum Juelich":

- C. Adolph, ..., B.R. Jany et al., Measurement of the $\eta \rightarrow 3\pi^0$ Dalitz plot distribution with the WASA detector at COSY, Physics Letters B, Volume 677, Issues 1–2, 15, 24-29 (2009) <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2009.03.063>
- B.R. Jany, Physics of $\eta' \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$ and $\eta' \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ decays, AIP Conference Proceedings 950, 209 (2007) <https://doi.org/10.1063/1.2819036>
- David Duniec, B.R. Jany, Neutral decays of η' at WASA-at-COSY, AIP Conference Proceedings 950, 213 (2007) <https://doi.org/10.1063/1.2819037>

W ramach mojego pobytu w Forschungszentrum-Juelich, Niemcy zarówno w okresie doktoratu jak i we wcześniejszym okresie w czasie studiów magisterskich powstała moja praca doktorska oraz praca magisterska. Obie prace zostały opublikowane na serwerze preprintow arXiv:

- Praca magisterska "Assembly and measurements of the Electromagnetic Calorimeter components for "WASA at COSY" setup" <https://arxiv.org/abs/physics/0606110>
- Praca doktorska "Leading Modes of the $3\pi^0$ production in proton-proton collisions at incident proton momentum 3.35GeV/c" <https://arxiv.org/abs/1109.5065>

Po uzyskaniu stopnia doktora, ze względów rodzinnych ograniczyłem wyjazdy naukowe do wyjazdów krótkoterminowych. Odbylem kilka krótkich staży oraz szkoleń naukowych²:

- Polska, Kraków, Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN, Mikrosofa 2019, szkoła techniki EBSD, 1 tydzień Czerwiec 2019
- Belgia, EMAT University of Antwerp, staż naukowy w ramach programu ERASMUS+, 1 tydzień Czerwiec 2018
- Polska, Katowice, Politechnika Śląska, Mikrosofa 2018, szkoła techniki mikroanalizy rentgenowskiej, 1 tydzień Lipiec 2018
- Belgia, EMAT University of Antwerp, staż naukowy, 1 tydzień Czerwiec 2017
- Polska, Kraków, Akademia Górniczo-Hutnicza, The 5th Stanisław Gorczyca European School on Electron Microscopy and Electron Tomography, 1 tydzień Czerwiec 2016
- Belgia, EMAT University of Antwerp, pomiary w ramach 20141212-Jany 312483 - ESTEEM2 (Integrated Infrastructure Initiative–I3) EU FP7, 1 tydzień Luty 2015
- Niemcy, AMETEK EDAX, Zaawansowane szkolenie z techniki EBSD, 1 tydzień Listopad 2014

¹ list Prof. Hansa Stroehera, dyrektora Instytutu IKP-2 Forschungszentrum-Juelich, Niemcy

² list Prof. Johana Verbeecka, kierownika grupy w EMAT University of Antwerp, Belgia

- Portugalia, Porto, EMAS 2013 Workshop, Warsztaty z mikroanalizy, 1 tydzień Maj 2014

W ramach mojej współpracy i wyjazdów do EMAT University of Antwerp, Belgia oraz projektu 20141212-Jany 312483 - ESTEEM2 (Integrated Infrastructure Initiative–I3) EU FP7 powstała publikacja:

[H4] **Benedykt R. Jany**, Nicolas Gauquelin, Tom Willhammar, Marek Nikiel, Karel H.W. van den Bos, Arkadiusz Janas, Konrad Szajna, Jo Verbeeck, Sandra Van Aert, Gustaaf Van Tendeloo, Franciszek Krok, Controlled growth of hexagonal gold nanostructures during thermally induced self-assembling on Ge(001) surface, *Sci. Rep.* 7, 42420 (2017) *autor korespondencyjny*

Prowadzę także badania w ramach współpracy międzynarodowej z:

Forschungszentrum-Juelich, Niemcy, w ramach tej współpracy powstały następujące artykuły:

- Dominik Wrana, Thomas Gensch, **Benedykt R. Jany**, Karol Cieřlik, Christian Rodenbächer, Grzegorz Cempura, Adam Kruk, Franciszek Krok, Photoluminescence imaging of defects in TiO₂: The influence of grain boundaries and doping on charge carrier dynamics, *Applied Surface Science* Volume 569, 150909 (2021)
- Christian Rodenbächer, Kristof Szot, Dominik Wrana, **Benedykt R. Jany**, Franciszek Krok, Carsten Korte, Localized electrochemical redox reactions in yttria stabilized zirconia single crystals, *Journal of Physics: Energy*, 2515-7655 (2020)
- Dominik Wrana, Christian Rodenbächer, **Benedykt R. Jany**, Aleksandr P. Kryshtal, Grzegorz Cempura, Adam Kruk, Paulina Indyka, Kristof Szot and Franciszek Krok, Bottom-up process of self-formation of highly conductive titanium oxide (TiO) nanowires on reduced SrTiO₃, *Nanoscale* 11, 89-97 (2019)
- D. Wrana, C. Rodenbuecher, M. Krawiec, **B. R. Jany**, J. Rysz, M. Ermrich, K. Szot and F. Krok, Tuning the surface structure and conductivity of niobium-doped rutile TiO₂ single crystals via thermal reduction, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19 (2017) 30339-30350

Friedrich Schiller University Jena, Niemcy, w ramach tej współpracy powstały następujące artykuły:

- Alper Özoęul, **Benedykt R. Jany**, Franciszek Krok, Enrico Gnecco & Mehmet Z. Baykara, Influence of Interfacial Oxidation on Friction in Structural Superlubricity, *Tribology Letters* volume 69, Article number: 105 (2021)
- Felix Trillitzsch, Arkadiusz Janas, Alper Özogul, Christof Neumann, Antony George, **Benedykt R. Jany**, Franciszek Krok, Andrey Turchanin and Enrico Gnecco, Scanning-Probe-Induced Assembling of Gold Striations on Mono- and Bi-Layered MoS₂ on SiO₂. *MRS Advances*, 1-7, (2020)

Montanuniversitat Leoben, Austria, w ramach tej współpracy powstały następujące artykuły:

- K. Szajna, M. Kratzer, D. Wrana, C. Mennucci, **B. R. Jany**, F. Buatier de Mongeot, C. Teichert and F. Krok, Influence of TiO₂(110) surface roughness on growth and stability of thin organic films, *J. Chem. Phys.* 145, 144703, (2016)
- D. Wrana, M. Kratzer, K. Szajna, M. Nikiel, **B.R. Jany**, M. Korzekwa, Ch. Teichert, F. Krok, Growth of para-Hexaphenyl Thin Films on Flat, Atomically Clean versus Air-Passivated TiO₂(110) Surfaces, *Journal of Physical Chemistry C* (2015).

Rozpocząłem nową współpracę międzynarodową z Institute of Applied Physics, Atomic and Plasma Physics Group, TU Wien, Austria z grupą Ass. Prof. dr Richarda A. Wilhelma. Współpraca związana jest badaniami oddziaływania wysoko naładowanych jonów (Highly Charged Ions - HCI) z powierzchniami metal/półprzewodnik w nanoskali. Złożyłem wniosek o finansowanie współpracy w ramach konkursu ogłoszonego przez NAWA. Wniosek jest w trakcie rozpatrywania.

6. Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę.

W ramach pracy na Uniwersytecie Jagiellońskim w Krakowie prowadzę zajęcia dydaktyczne wynikające z pensum dydaktycznego (210 godzin rocznie). Jakość zajęć dydaktycznych jest ewaluowana przez studentów w formie anonimowych ankiet. Mój średni wynik z tych ankiet z ostatnich lat (od 2017 roku) wynosi 93.67 punktu na 100 możliwych punktów. Co zgodnie z kryteriami na Uniwersytecie jest oceniane jako bardzo wysoki wynik (81-100 punktów), zgodnie z danymi zawartymi w systemie informatycznym (PI) Uczelni.

W ramach mojej działalności dydaktycznej stworzyłem nowy kurs dla doktorantów i studentów starszych lat "Analiza Komputerowa Obrazów Mikroskopowych". Kurs od początku jego powstania cieszy się dużym zainteresowaniem studentów i doktorantów i jest dobrze przez nich oceniany.

Jestem także opiekunem ćwiczenia "Badanie składu substancji stałych i ciekłych metodą rentgenowskiej spektroskopii fluorescencyjnej (XRF)" w ramach II Pracowni Fizycznej.

Angażowałem się dodatkowo w kilka akcji popularyzujących naukę prowadzonych przez Uniwersytet takich jak:

- Prezentacja laboratoriów podczas Nocy Naukowców
- Wykład dla gimnazjalistów w ramach Akademii Fizyki
- Dodatkowe ćwiczenia laboratoryjne dla doktorantów w ramach projektu SET (2013-2015)
- Dodatkowe kursy dla studentów w ramach projektu ZintegrUJ – Kompleksowy Program Rozwoju Uniwersytetu Jagiellońskiego, finansowanego z funduszy Narodowego Centrum Badań i Rozwoju

Ponadto od 2017 roku jestem lokalnym koordynatorem międzynarodowej sieci "PCAM - Physics and Chemistry of Advanced Materials: A European Doctorate Network <https://www.pcam-doctorate.eu/>" dla całego Uniwersytetu.

Jestem także przedstawicielem od 2017 roku pomocniczych pracowników naukowych w Radzie Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ oraz w Radzie Instytutu Fizyki UJ

Byłem także promotorem pomocniczym doktoratu Pana dr Arkadiusza Janasa. Obrona pracy doktorskiej odbyła się w 2020 roku.

7. Oprócz kwestii wymienionych w pkt. 1-6, wnioskodawca może podać inne informacje, ważne z jego punktu widzenia, dotyczące jego kariery zawodowej.

Aktualnie kontynuuję moje badania procesów oddziaływania metali z podłożami półprzewodnikowymi w ramach przyznanego grantu NCN Miniatura 4 (DEC-2020/04/X/ST5/00539) "Próba syntezy nowych faz metali typu hcp w procesie samoorganizacji indukowanej temperaturowo w skali nano", którego jestem kierownikiem.

Byłem kierownikiem w następujących grantach:

- K/DSC/004340/2017 "Synteza i charakterystyka anizotropowych nanostruktur przewodzących na powierzchniach półprzewodnikowych do zastosowań nanoelektronicznych" w ramach MNiSzW Nr 7150/E-338/M/2017
- K/DSC/003656/2016 "Charakterystyka oraz badanie mechanizmu wzrostu fazy Auhcp" w ramach MNiSzW Nr 7150/E-338/M/2016
- K/DSC/002712/2015 "Przełączanie rezystywne w TiO₂: wpływ redukcji termicznej oraz domieszkowania atomami niobu na własności elektryczne i chemiczne" w ramach MNiSzW Nr 7150/E-338/M/2015
- 20141212-Jany "Diffusion effects investigation of self-organized Au Structures on Ge(001)" w ramach 312483 - ESTEEM2 (Integrated Infrastructure Initiative-I3) EU FP7
- K/DSC/002042/2014 "Charakteryzacja temperaturowo indukowanej dynamiki zmian morfologii nanostruktur metalicznych" w ramach MNiSzW Nr 7150/E-338/M/2014

Pracowałem także jako wykonawca w następujących grantach:

- NCN Opus 2018/29/B/ST5/01406 "Synteza oraz charakteryzacja nanostruktur TiO powstających na powierzchniach termicznie zredukowanych tlenków metali przejściowych"
- Interreg Europe #R002BalticTRAM "Transnational research access in the macro-region (Baltic TRAM)"
- NCN Opus 2015/19/B/ST5/01841 "Defekty strukturalne i elektronowe zredukowanych powierzchni kryształów TiO₂(110) i ich wpływ na charakter interfejsu wzrastających nanostruktur molekularnych"
- NCN Opus 2011/03/B/ST5/01567 "Nanostrukturyzacja powierzchni krystalicznych w wyniku oddziaływania z wiązką jonową"
- NCN Harmonia 2012/06/M/ST5/00419 "Badania w skali nanometrowej mechanicznych i elektrycznych właściwości warstw molekularnych przygotowanych na podłożach z SiO₂, TiO₂ oraz grafenu"
- NCN Opus 2012/07/B/ST5/00906 "Synteza powierzchniowych, samoorganizujących się nanostruktur metalicznych na powierzchniach kryształów półprzewodnikowych"

Uzyskałem następujące nagrody i wyróżnienia:

- Nagroda Rektora zespołowa III stopnia w roku akademickim, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie 2019
- Nagroda Dziekana Wydziału Fizyki za najlepsze publikacje w 2019 roku, Kraków 2019
- Wykład Zaproszony w ramach "2018 ASC Winter School- European ASC Master's Course", 26.02.2018-02.03.2018 Kraków
- Nagroda Dziekana Wydziału Fizyki za najlepsze publikacje w 2019 roku, Kraków 2018

Benedykt R. Jany

- Nagroda Rektora zespołowa III stopnia w roku akademickim, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie 2015
- Zdjęcie miesiąca "FEI microscopy image international contest" 2014

Jestem zastępcą kierownika laboratorium skaningowej mikroskopii elektronowej SEM. Laboratorium działa w ramach powstałego na Uniwersytecie Jagiellońskim Ośrodka Badań Właściwości Fizykochemicznych Materiałów. W laboratorium wdrażany jest system zarządzania jakością ISO 17025. Laboratorium stara się o uzyskanie akredytacji PCA.

Od 2016 roku regularnie recenzuje artykuły dla czasopisma z grupy Nature - Scientific Reports (<https://www.nature.com/srep/>) Impact Factor 5.13.

Ostatnio recenzowałem artykuł dla czasopisma npj Computational Materials (grupa Nature) (<https://www.nature.com/npjcompumats/>) Impact Factor 13.2.

Recenzowałem także artykuł dla Polskiego czasopisma ITME Electronic Materials (http://www.itme.edu.pl/index.php?page=library/materialy_elektroniczne).

Mój nr ORCID <https://orcid.org/0000-0002-3196-7244>



Podpis Wnioskodawcy

ⁱ Brody, H. Gold. Nature 495, S1–S1 (2013).

ⁱⁱ Blumenstein, C. et al. Atomically controlled quantum chains hosting a Tomonaga-Luttinger liquid. Nat Phys 7, 776–780 (2011).

ⁱⁱⁱ Okamoto, H., Massalski, T.B. The Au–Ge (Gold-Germanium) system. Bulletin of Alloy Phase Diagrams 5, 601–610 (1984).

^{iv} Au hcp (Hexagonal Gold) CIF structure file Crystallography Open Database COD 1545302, <http://www.crystallography.net/cod/1545302.html>

^v Jany, Benedykt R., "Python Jupyter Notebook to Perform Automatic Microscopic Image Analysis by Moving Window Local Fourier Transform and Machine Learning", Mendeley Data, V2, (2019) doi: 10.17632/25x46xjyr5.2

^{vi} J. A. del Alamo Nanometre-Scale Electronics with III–V Compound Semiconductors, Nature, 479, 317–323 (2011).

^{vii} H. Schmid et al., Template-Assisted Selective Epitaxy of III–V Nanoscale Devices for Co-Planar Heterogeneous Integration with Si, Appl. Phys. Lett. (2015).

- ^{viii} D.-M. Geum et al., Ultra-High-Throughput Production of III-V/Si Wafer for Electronic and Photonic Applications, *Sci. Rep.*, 2016, 6 , 20610 (2016).
- ^{ix} X. Duan et al., Indium Phosphide Nanowires as Building Blocks for Nanoscale Electronic and Optoelectronic Devices, *Nature*, 409 , 66 —69 (2001).
- ^x Marshall I. Nathan et al., STIMULATED EMISSION OF RADIATION FROM GaAs p-n JUNCTIONS, *Appl. Phys. Lett.* 1, 62 (1962).
- ^{xi} W. S. Torgerson Multidimensional Scaling: I. Theory and Method, *Psychometrika*, 17 , 401 —419 (1952).
- ^{xii} J. MacQueen Some Methods for Classification and Analysis of Multivariate Observations, *Fifth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*; University of California Press , Berkeley, Calif., 281–297 (1967).
- ^{xiii} V. Dolores-Calzadilla, B. Romeira, F. Pagliano, S. Birindelli, A. Higuera-Rodriguez, P.J. van Veldhoven, M.K. Smit, A. Fiore, D. Heiss, Waveguide-Coupled Nanopillar Metal-Cavity Light-Emitting Diodes on Silicon *Nature Commun.*, 8 p. 14323 (2017).
- ^{xiv} R. Janissen, P.K. Sahoo, C.A. Santos, A.M. da Silva, A.A.G. von Zuben, D.E.P. Souto, A.D.T. Costa, P. Celedon, N.I.T. Zanchin, D.B. Almeida, D.S. Oliveira, L.T. Kubota, C.L. Cesar, A.P. de Souza, M.A. Cotta InP Nanowire Biosensor with Tailored Biofunctionalization: Ultrasensitive and Highly Selective Disease Biomarker Detection, *Nano Lett.*, 17 (10), pp. 5938-5949 (2017).