

Prof. dr hab. Jacek A. Majewski
Katedra Fizyki Materii Skondensowanej
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski
Ul. Hoża 69
00-681 Warszawa

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Pawła Jakubasa

W przedstawionej do recenzji rozprawie doktorskiej pana mgr Pawła Jakubasa zatytułowanej: „**Theory of generation of Frenkel pairs in semiconductors: consequences for electric, magnetic and structural properties**” zastosowano obliczenia z pierwszych zasad do zbadania mechanizmów tworzenia się rodzimych defektów - *par Frenkla* - w półprzewodnikach. Fizyka defektów w półprzewodnikach w ogólności ma ogromne znaczenie dla technologii tych materiałów. W Rozprawie dokonano niezwykle szczegółowej i głębokiej analizy fizycznych mechanizmów tworzenia się par Frenkla, stanowiących ważną klasę defektów w technologicznie istotnych związkach półprzewodnikowych. Uprzedzając dokładniejszą analizę przedstawionej rozprawy doktorskiej, recenzent z uznaniem przyznaje, że prezentowana Rozprawa w znacznym stopniu przyczynia się do zwiększenia naszej wiedzy i zrozumienia mechanizmów tworzenia się defektów w związkach półprzewodnikowych oraz wpływu defektów na optyczne, elektryczne i magnetyczne własności półprzewodników, jak również stanowi niezwykle cenne studium stosowanej metodyki obliczeń numerycznych.

Narzędziem stosowanym w Rozprawie są złożone obliczenia numeryczne oparte o metodę funkcjonału gęstości, które zastosowane do problemu będącego przedmiotem rozprawy wymagały zastosowania najwocześniejszych technologii komputerowych i optymalizacji programów numerycznych. Recenzent z uznaniem przyznaje, że doktorant potrafił z ‘gąszczu’ wyników numerycznych wyekstrahować niezwykle interesującą fizykę tworzenia się badanych defektów i ich wpływu na fizyczne własności badanych półprzewodników.

Przedstawiona rozprawa składa się zasadniczo z czterech części. W części pierwszej przedstawiono stosowane metody teoretyczne, w części drugiej, będącej znakomitym

wprowadzeniem do zasadniczej części Rozprawy, wyniki badań dotyczące izolowanych rodzimych defektów (luk i atomów międzywęzłowych) w CdTe i ZnTe, w części trzeciej, będącej główną częścią Rozprawy, badania dotyczące par Frenkla (tzn. luki i atomu międzywęzłowego) w stopach CdZnTe, a w części czwartej, która może być traktowana jako pewien rodzaj uzupełnienia i porównania badanych związków półprzewodnikowych typu II-VI z innymi półprzewodnikami, przedstawiono wyniki badań dotyczące par Frenkla w GaAs, kubicznym węglu krzemu, tlenku cynku oraz azotku galu. Rozprawę kończy krótkie podsumowanie wyników oraz bibliografia. Metody teoretyczne stosowane w pracy doktorskiej zostały przedstawione zwięźle w rozdziale 1. Do analizy problemu defektów, ze swojej natury łamiącego symetrię translacyjną kryształu, stosowany jest kod numeryczny zakładający periodyczność układu, tzw. przybliżenie supersieci. Chociaż jest to powszechnie stosowane podejście, wymaga dużej ostrożności przy analizie otrzymanych wyników. Doktorant poświęca temu problemowi należytą uwagę i szczegółowo opisuje metody używane do korekty artefaktów wynikających z założonej periodyczności układu numerycznych.

Układ pracy jest przejrzysty, praca jest niezwykle starannie zredagowana, napisana poprawnym językiem angielskim, z rysunkami wysokiej jakości i obszerną bibliografią, zawierającą najważniejsze dane literaturowe dotyczące badanych systemów, metod obliczeniowych stosowanych w rozprawie, jak również wcześniejszych prac naukowych. Rozprawa zawiera ogromny materiał faktograficzny, co zasadniczo nie sprzyja przejrzystości i łatwości czytania, niemniej doktorant poradził sobie bardzo dobrze z przedstawieniem wykonanych niezwykle obszernych obliczeń numerycznych.

Lektura rozprawy przekonuje recenzenta, że doktorant posiadał umiejętność w posługiwaniu się nowoczesnymi metodami obliczeń *ab initio*. Na szczególne podkreślenie zasługuje również bardzo staranne zbadanie zbieżności otrzymanych wyników w zależności od parametrów decydujących o przebiegu i dokładności obliczeń. Dla każdego, kto zajmował się obliczeniami numerycznymi jest jasne, że stanowi to podstawę oceny wiarygodności uzyskanych wyników. Doktorant radzi sobie również bardzo dobrze z fizyczną analizą otrzymanych wyników i porównaniem z istniejącymi danymi doświadczalnymi.

Za najważniejsze osiągnięcie rozprawy, zdaniem recenzenta, należy uznać głębokie studia energetyki tworzenia defektów rodzimych oraz ich dyfuzji w związkach CdTe, ZnTe, i ich stopach. Stwarza to teoretyczne podstawy studiów defektów w innych materiałach. Niezwykle oryginalne i interesujące wydają się również wnioski dotyczące zjawiska przełączania przewodności i 'ferroelektryczności' stopów CdZnTe.

Reasumując, uważam przedstawioną rozprawę doktorską za bardzo dobrą, zawierającą ważne wyniki kwalifikujące się do publikacji w czasopismach o zasięgu światowymi, co w dużej mierze miało już miejsce. W opinii recenzenta przedstawiona rozprawa doktorska jednoznacznie kwalifikuje mgr Pawła Jakubasa do otrzymania stopnia naukowego doktora nauk fizycznych. W związku z tym wnoszę o dopuszczenie mgr Pawła Jakubasa do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Praca doktorska mgr. Pawła Jakubasa wyróżnia się spośród znanych recenzentowi nawet bardzo dobrych prac doktorskich. Niezwykle rzetelne i szczegółowe przedstawienie oraz ocena stosowanego warsztatu badawczego dają świadectwo dużej dojrzałości naukowej doktoranta i gruntownego zrozumienia bardzo zaawansowanych technik obliczeniowych. Niezwykle obszerne wyniki oraz ich doskonała analiza świadczą również o naukowej dociekliwości i głębokim zrozumieniu mechanizmów fizycznych. Praca wnosi również niezwykle cenny i unikalny na światową skalę wkład do zrozumienia fizycznych mechanizmów powstawania par Frenkiela w półprzewodnikach i wpływu tych defektów na własności półprzewodników. Recenzent chciałby również zwrócić uwagę na duży dorobek naukowy doktoranta nie umieszczony w Rozprawie. Przyjemność uczestniczenia w wielu dyskusjach z doktorantem dała recenzentowi możliwość przekonania się o rozległych zainteresowaniach doktoranta i jego dogłębnym zrozumieniu ważnych problemów fizyki półprzewodników. Mając nieczęsto do czynienia z tej klasy pracami doktorskimi, **recenzent występuje o wyróżnienie rozprawy doktorskiej.**

Warszawa, 27.09.2009



Jacek A. Majewski