

Warszawa, 24.06.2024

Dr hab. inż. Paweł Strak, prof. IWC PAN

Instytut Wysokich Ciśnień PAN

Sokołowska 29/37, 01-142 Warszawa

strak@unipress.waw.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej mgra inż. Jakuba Ziembickiego, pt. „Badania obliczeniowe z zasad pierwszych kryształów półprzewodnikowych o strukturze wurcytu i blendy cynkowej do zastosowań w optoelektronice” opracowana na zlecenie Rady Dyscypliny Naukowej Nauki Fizyczne Politechniki Wrocławskiej

Rozprawa doktorska mgra inż. Jakuba Ziembickiego zatytułowana „Badania obliczeniowe z zasad pierwszych kryształów półprzewodnikowych o strukturze wurcytu i blendy cynkowej do zastosowań w optoelektronice”, wykonana pod opieką naukową dr hab. inż. Paweła Scharocha i dr inż. Macieja Polaka, podejmuje zagadnienia związane z określeniem własności mechanicznych i elektronowych przy pomocy metod obliczeniowych, materiałów półprzewodnikowych na bazie pierwiastków III-V oraz IV grupy układu okresowego. Doktorant koncentruje się na wyznaczeniu trendów dla zależności różnych własności mechanicznych i elektronowych w badanych materiałach.

Przedłożona mi do oceny rozprawa doktorska zawiera cztery rozdziały. Rozdział pierwszy poświęcony jest opisowi modeli i przybliżeń używanych w tej pracy do opisu właściwości elektronowych. W pierwszej sekcji, rozpoczynając od fundamentalnej teorii, jaką jest mechanika kwantowa, wyprowadzany jest hamiltonian elektronowy. Na podstawie tego hamiltonianu, w drugiej sekcji wprowadzana jest teoria DFT. W trzeciej sekcji opisano używane w DFT przybliżenia funkcjonału korelacyjno-wymennego. W czwartej sekcji opisane są przybliżenia numeryczne stosowane w obliczeniach DFT. Piąta ostatnia sekcja poświęcona jest formalizmowi $k \cdot p$, który jest używany razem z DFT do opisu właściwości elektronowych.

W drugim rozdziale zbadano właściwości półprzewodników III-V w strukturze krystalograficznej blendy cynkowej oraz wurcytu. Na początku wyznaczono właściwości fizyczne takie jak parametry geometryczne, energię formacji, stałe elastyczne oraz piezoelektryczne. Przeprowadzono obszerną dyskusję właściwości elektronowych czyli struktur pasmowych, przerw wzbronionych, rozszczepień pasm czy względnego położenia pasm. Opisano także wpływ naprężeń na strukturę pasmową.

W trzecim rozdziale przeprowadzono kompleksowe badanie czterech faz krystalograficznych półprzewodników grupy IV oraz ich związków binarnych. Wyznaczono równowagowe geometrie oraz współczynniki sprężystości objętościowej, użyto wcześniej zaproponowanego modelu do opisu stabilności różnych politypów.

Również tutaj duży nacisk został położony na analizę właściwości elektronowych, z uwzględnieniem przerw wzbronionych. Przeprowadzono przegląd materiałów pod względem ich potencjalnego zastosowanie w optoelektronice, uwzględniając aktualny stan wiedzy w tym zakresie.

W czwartym rozdziale zbadano wpływ mieszania azotku galu z różnymi atomami z grupy III i V na strukturę elektronową. W tym celu użyto metody superkomórkowej połączonej z specjalnymi strukturami quasilosowymi oraz metodą odwijania struktury pasmowej. Analiza pokazała, że zastępowanie azotu innymi atomami grupy V wprowadza w przerwie nowe stany, co dla przypadku mieszania z arsenem zostało potwierdzone eksperymentalnie. Z drugiej strony zastępowanie galu przez glin i aluminium nie wprowadza żadnych nowych stanów, zmienia jedynie przerwę wzbronioną. Efekt został wytłumaczony poprzez dystorsję geometrii struktury GaN przez atomy grupy V. Jako powód wskazano różnicę w wielkościach atomów oraz elektrojemnościach.

Opiniowana praca ma charakter badań podstawowych, dobór metod badawczych do postawionych problemów jest prawidłowy. Na uznanie zasługuje także szeroki zakres pracy. Wysoko oceniam formę prezentacji rozprawy doktorskiej Pana mgr inż. Ziembickiego, struktura pracy jest dobrze przemyślana. Autor zadbał o wysokiej jakości materiał ilustracyjny a praca została napisana czytelnym językiem. W pracy zacytowano 158 pozycji, co pozwoliło na właściwe wprowadzenie w obszar badań przedstawionych w rozprawie.

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska jest opracowaniem napisanym w języku polskim – liczy 86 stron, zawiera 47 rysunków i 10 tabel. Struktura pracy jest typowa dla tego typu opracowań naukowych. Rozprawę podzielono na jeden rozdział opisujący metodologię badań oraz trzy rozdziały zawierające wyniki badań własnych autora wraz z omówieniem i wnioskami. Autor rozprawy jest współautorem czterech publikacji w czasopismach z listy JCR (z bazy Scopus 24.06.2024), z czego jest pierwszym autorem jednej publikacji. Publikacja ta jest cytowana w recenzowanej pracy. Wszystkie rozdziały Autor przygotował z bardzo dużą starannością zarówno ciągu logicznego zagadnień, jak i materiałów ilustrujących je. Wyniki badań własnych zaprezentowano w sposób przejrzysty, niestety w dużej mierze zabrakło odnoszenia się do danych literaturowych, tam gdzie one istnieją. W rozdziale pierwszym zabrakło mi szerszego opisu metody zwijania pasm, którą Autor stosuje w kolejnych rozdziałach. W rozdziale drugim w sekcji „Polaryzacja spontaniczna i właściwości piezoelektryczne” brakuje mi przedyskutowania otrzymywanych wartości polaryzacji spontanicznej ze względu na inny rodzaj układu referencyjnego np. blendy cynkowej. W pracy [F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt Phys. Rev. B 56, R10024(R) 1997] autorzy wyznaczyli polaryzację spontaniczną z teorii Resty korzystając z układów referencyjnych w postaci blendy cynkowej i otrzymali wyniki o rząd wielkości mniejsze, niż w przypadku korzystania z układów referencyjnych heksagonalnych. Oba układy referencyjne mają zerową polaryzację spontaniczną a wyniki są różne, czy to oznacza, że teoria Resty ma jakiś mankament? Dodatkowo na wykresach struktur pasmowych brakuje mi położenia poziomu

Fermiego. Kolejną rzeczą jest fakt, że Autor w kilku miejscach pracy oblicza energię punktu rozgałęzienia i wyznacza z tego punktu własności fizyczne takie jak np. „band offset”, według mnie, opis tej metody jest niewystarczający i powinien się w szerszym zakresie pojawić w pracy. Niemniej jednak pomimo tych kilku uwag krytycznych, cel pracy, w mojej ocenie, jasno wynika z jej treści, a zakres pracy nie budzi wątpliwości.

Biorąc pod uwagę zakres przeprowadzonych prac oraz sposób ich realizacji, pomimo uwag krytycznych, należy stwierdzić, że Autor wykazał się dobrym opanowaniem warsztatu badawczego. Pozwoliło to w sposób prawidłowy zrealizować zaplanowane w pracy zadania, uzyskać wartościowe wyniki i na ich podstawie sformułować właściwe wnioski, a wskutek tego zrealizować założony cel pracy. Na podstawie poniższych stwierdzeń wyrażam opinię, że rozprawa doktorska mgr inż. Jakuba Ziembickiego pt. „Badania obliczeniowe z zasad pierwszych kryształów półprzewodnikowych o strukturze wurcytu i blendy cynkowej do zastosowań w optoelektronice” spełnia wymagania ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U. 2023 poz. 742) i wnoszę o dopuszczenie jej Autora do publicznej obrony przed Radą Dyscypliny Naukowej Nauki Fizyczne Politechniki Wrocławskiej.

Ryszard Strąpek