

Stanisław Krukowski
Instytut Wysokich Ciśnień
Polska Akademia Nauk
01-142 Warszawa
ul. Sokołowska 29/37

Recenzja
pracy doktorskiej magistra Piotra Traczykowskiego
pod tytułem
„Wykorzystanie statyki molekularnej do modelowania procesów deformacji kryształów
półprzewodnikowych”

Praca doktorska mgr Piotra Traczykowskiego pod tytułem „Wykorzystanie statyki molekularnej do modelowania procesów deformacji kryształów półprzewodnikowych” wykonana pod kierunkiem dr hab. inż. Pawła Dłużewskiego w Instytucie Podstawowych Problemów Techniki PAN jest poświęcona zagadnieniom modelowania numerycznego własności elastycznych i plastycznych kryształów i materiałów półprzewodnikowych. Celem pracy było zbudowanie narzędzia numerycznego do analizy odkształceń dużej skali w kryształach półprzewodnikowych, a ponadto zastosowanie go do modelowego przypadku struktur opartych na kropkach kwantowych.

Należy ocenić, że wykonana praca zakończyła się sukcesem, tzn. skonstruowaniem odpowiedniego zestawu narzędzi matematycznych i numerycznych w postaci skończonego zestawu programów i procedur numerycznych, umożliwiających obliczanie własności kryształów w półprzewodnikach nietypowej sytuacji charakteryzującej się występowaniem odkształceń dużej skali. Narzędzie to może być szczególnie użyteczne w przypadku badań szczególnie zaawansowanych układów półprzewodnikowych należących do szybko rozwijającej się dziedziny technologii kwantowych niskowymiarowych nanostruktur półprzewodnikowych, takich jak kropki, druty i studnie kwantowe. Fakt że jest to narzędzie uniwersalne pozwala na jego zastosowanie w badaniach szeregu układów półprzewodnikowych o różnych własnościach fizycznych.

Technicznie praca jest zastosowaniem układu równań typowego dla dynamiki molekularnej i przekształceniem ich do zestawu zmiennych typowego dla metody elementu skończonego. Rozważane układy dynamiki molekularnej obejmują oddziaływanie dwu- i trzycząstkowe o stosunkowo krótkim zasięgu, co jest warunkiem wystarczającym dla modelowania układów kryształów półprzewodników oraz gazów szlachetnych. Zasięg oddziaływania uniemożliwia zastosowanie tego modelu dla układów jonowych. Dodatkowe możliwości rysują się w dziedzinie kryształów molekularnych. Wykonane przekształcenia umożliwiają zastosowanie uniwersalnego solwera programu FEAP, o wysokiej stabilności i szybkości co stanowi o sile programu. Otrzymane równania pozwalają w przyszłości zastosowanie także innych solwerów po odpowiednich modyfikacji i kompilacji kodu źródłowego.

Rozprawa doktorska mgr Traczykowskiego składa się z 6 rozdziałów obejmujących wstęp, informacje o układach będących przedmiotem rozważań, opisu teoretycznych podstaw metody oraz opis zagadnień nieliniowej teorii sprężystości oraz rozdział zawierający opis

zastosowania metody do układów zawierających pojedynczą oraz wiele kropek kwantowych. Rozdział ten zawiera porównanie wyników teoretycznych z wynikami uzyskanymi za pomocą mikroskopu HRTEM. Ponadto w rozdziale tym są zawarte informacje na temat zbieżności metody. Praca kończy się rozdziałem zawierającym podsumowania i wnioski. Uzupełnieniem pracy jest dodatek A zawierający kody źródłowe opracowane i zastosowane w ramach tej rozprawy.

Wstęp zawiera informacje na temat statyki i dynamiki molekularnej, definiuje zakres pracy i określa metody stosowane w badaniach opisanych w tej rozprawie. Zawiera również opis historyczny rozwoju metody. Opis ten w sposób prawidłowy opisuje wstępne etapy rozwoju dynamiki molekularnej. Zawiera on także pewne kontrowersyjne stwierdzenia, takie jak np. określenie metody Aldera i Wainwrighta jako metod zbliżonych do metody dynamiki molekularnej. Mimo że metody te posługiwały się potencjałem twardych sfer, to jednak z reguły uważa się je za pierwsze prace z tej metody. W sumie jednak opis historyczny uważam za prawidłowy. Innym aspektem jest opis zastosowań metody dynamiki molekularnej. Ze względu na ogromne pole zastosowań tej metody opis ten nie jest wyczerpujący. Jednak spełnia podstawowe zadanie zobrazowania uniwersalności metody i jej znaczenia w badaniach różnorodnych układów fizycznych, biochemicznych czy nawet biologicznych.

Rozdział drugi zawiera opis własności podstawowych układów krystalograficznych ze szczególnym uwzględnieniem typowych układów półprzewodnikowych. Z natury opis ten musi być fragmentaryczny, jednak wprowadza w sposób wystarczająco dokładny podstawowe własności tych układów. W szczególności istotne w tym kontekście jest wprowadzenie własności związanych z obecnością defektów sieci krystalograficznej. W rozdziale trzecim wprowadzone są dynamiczne podstawy metody dynamiki molekularnej, takie jak potencjały oddziaływania, itp. W zasadzie jest to wystarczające wprowadzenie tego zagadnienia, jednak możliwe byłoby bardziej obszerne potraktowanie tego tematu i omówienie szerszego zakresu materiałów.

Rozdział czwarty zawiera omówienie nieliniowej teorii sprężystości, przy uwzględnieniu różnych sformułowań równań konstytutywnych teorii hipersprężystości. Wprowadzenie to ma charakter bardzo formalny i zawiera jedynie skrótowe potraktowanie tego tematu. Autor czyni uwagę, że jest to wynikiem jego doświadczeń numerycznych z zastosowaniem metod hipersprężystości dla badania różnych układów, jednak wydaje się, że dla jasności wyводу byłoby celowe głębsze omówienie tych problemów. Wydaje się też, że celowe byłoby uzupełnienie rozdziału o pewne definicje pojęć występujących w tym rozdziale, np. definicje prawego i lewego tensora rozciągłości, itp.

Rozdział piąty zawiera opis algorytmu modelowania metodą statyki molekularnej. Pokazany jest sposób odwzorowania układu współrzędnych atomów i ich oddziaływań na zmienne typowe dla metody elementu skończonego. W rozdziale tym są przedstawione wyniki obliczeń dla pojedynczej kropki kwantowej. Wyniki te są uzupełnione porównaniem z wynikami pomiarów dla układów kropek kwantowych CdTe w matrycy ZnTe. Wyniki te otrzymano dla układów otrzymanych podczas wzrostu warstw w modzie Stranski-Krastanow tzn. w układzie z warstwą zwilżającą. Typowe układy zawierają około 170 tys. atomów, co ilustruje rozmiar zagadnienia. Otrzymane wyniki teoretyczne są zaprezentowane przy użyciu preprocesora graficznego FEAP i wykazują zgodność z wynikami TEM. Rozdział kończą uwagi na temat zbieżności zawierające również dane dotyczące wymiarów problemu.

Rozprawa jest zakończona podsumowaniem w którym są wyciągnięte wnioski, i omówione zalety i wady metody statyki molekularnej. Podkreśla się że charakter odwzorowania ogranicza zakres dopuszczalnych przemieszczeń atomów. Istotną zaletą jest natomiast możliwość stosowania tej metody do szeregu interesujących układów fizycznych bazujących na strukturach kwantowych, w tym wypadku głównie kropek kwantowych. Otrzymanie tych wyników stwarza nowe interesujące możliwości, jednak należy mieć na uwadze że sama metoda statyki molekularnej jest numerycznie trudniejsza od metody dynamiki molekularnej, co prowadzi do statystycznej zależności w której prace statyki molekularnej są w literaturze naukowej co najmniej 100-krotnie mniej liczne niż prace z zakresu standardowej dynamiki molekularnej.

Praca jest uzupełniona spisem publikacji autora zawierających 6 publikacji i komunikatów konferencyjnych otrzymanych przy użyciu metody i programów opracowanych w ramach tej rozprawy. Wynik ten uważam za dobry.

Rozprawa jest napisana w sposób prawidłowy. Założenia pracy, metody naukowe i otrzymane wyniki są przedstawione jasno i czytelnie. Praca zwiera stosunkowo niewiele błędów gramatycznych i językowych.

W podsumowaniu stwierdzam że ta rozprawa spełnia wymogi stawiane pracom doktorskim.



Stanisław Krukowski

Warszawa 3 listopada 2005 r