

Warszawa, 28.IX. 2005

Włodzimierz Sosnowski  
Doc. dr hab. inż.  
IPPT PAN  
Zakład Metod Komputerowych  
Pracownia Metod Obliczeniowych Mechaniki Nieliniowej  
Ul. Świętokrzyska 21, 00049 WARSZAWA  
e-mail: [wsosn@ippt.gov.pl](mailto:wsosn@ippt.gov.pl)

## RECENZJA

rozprawy doktorskiej p. mgr. Piotra Traczykowskiego pt. „Wykorzystanie statyki molekularnej do modelowania procesów deformacji kryształów półprzewodnikowych”

### 1. Cel i zawartość pracy

Celem rozprawy doktorskiej p. mgr. Piotra Traczykowskiego było zbudowanie narzędzia numerycznego do przeprowadzenia obliczeń komputerowych służących do wyznaczenia konfiguracji równowagowej atomów rzeczywistych kryształów o strukturze zaburzonej defektami. Autor zaadoptował do tego celu algorytm metody elementów skończonych (MES) i włączył do nich równania statyki molekularnej.

Praca zawiera 110 stron, w tym wstęp zawierający rzeczowy przegląd literatury, dwa rozdziały poświęcone omówieniu punktu startowego badań, dwa rozdziały zasadnicze stanowiące opis wyników uzyskanych przez Autora, podsumowanie, spis rysunków, bibliografię oraz dodatek z kodami źródłowymi najważniejszych procedur numerycznych.

We wstępie Autor zwraca uwagę na fakt, że tylko pozornie obliczenia z wykorzystaniem statyki molekularnej mogą być prostsze niż obliczenia uwzględniające dynamikę atomów. W rzeczywistości metody dynamiki molekularnej pozwalają jedynie w sposób jawny całkować równania ruchu atomów i w efekcie nie dają możliwości określenia konfiguracji równowagowej wewnątrz kryształu. Taką konfigurację można zidentyfikować wykorzystując równania statyki molekularnej i solwery MES. Ceną jest konieczność dość pracochłonnego wprowadzenia pierwszych i drugich pochodnych potencjałów oddziaływań międzyatomowych do programu MES oraz odwracania bardzo dużych macierzy zawierających miliony stopni swobody.

Dalsze dwa rozdziały zawierają podstawowe informacje o półprzewodnikach oraz podstawy teoretyczne statyki i dynamiki molekularnej. Biorąc pod uwagę nowatorstwo podjętej tematyki takie obszernie omówienie stanu wiedzy jest uzasadnione a dodatkowo ta część pracy posiada spore walory dydaktyczne.

W rozdziałach 4 i 5 Autor pokazuje, w jaki sposób można wprowadzić potencjały oddziaływań międzyatomowych do równań statyki i prezentuje sposoby modelowania kryształów półprzewodnika zawierających celowo fabrykowane kropki kwantowe. Rozdziały te zawierają również obliczenia przemieszczeń atomów w

układach kropek kwantowych . Chodzi o określenie pozycji atomów kropki telurku kadmu (CdTe) w siatce atomów telurku cynku (ZnTe). Obliczenia potwierdziły przewidywany efekt “rozpychania się” kropki kwantowej spowodowany jej większymi rozmiarami. W dalszych podrozdziałach Autor pokazuje, jak można symulować komputerowo obrazy z wysokorozdzielczych mikroskopów elektronowych (HRTEM). Następnie porównuje wyniki symulacji z obserwacjami eksperymentalnymi i wykazuje, że takie symulacje mogą wzbogacić eksperyment dzięki wprowadzeniu trzeciego wymiaru.

## 2. Uwagi ogólne.

1. W kilku miejscach Autor podkreśla ważne zalety włączenia do MES równań statyki molekularnej. Niestety opis tego połączenia nie jest dostatecznie jasny. Dopiero uważna analiza dodatku, w którym zamieszczono kody źródłowe programu numerycznego pozwala zidentyfikować lokalne macierze sztywności uzyskane po zróżniczkowaniu funkcji energii oddziaływań międzyatomowych – w tym przypadku potencjału Stilingera – Webera. Recenzent sugeruje zapoznanie się z pracą 'Wing Kam Liu, Harold S. Park , Bridging Scale Methods for Computational Nanotechnology dostępną w Internecie pod adresem [www.tam.northwestern.edu/wkl/](http://www.tam.northwestern.edu/wkl/) lub\_wchodząc na stronę Prof. Wing Kam Liu, gdzie można znaleźć podobne macierze podane w sposób jawny.
2. Autor wykorzystuje 2 i 3-węzłowe “pseudoelementy” skończone. W klasycznym sformułowaniu MES fragmenty układu modelowane takimi elementami są zawsze rozłączne. Z tekstu (por. str 56 – 57) wynika, że Autor stosuje obydwa rodzaje elementów do dyskretyzacji tego samego obszaru. Jeżeli tak nawet nie jest w programie, to nadal nie wiadomo, jak sumowana jest energia odpowiadająca kolejnym elementom. Istnieje niebezpieczeństwo, że energia może być sumowana dwukrotnie dla tego samego obszaru, raz jako udział oddziaływań trzech, a raz dwu tych samych atomów!
3. W pracy nie skomentowano zagadnienia błędów modelowania wynikającego z pominięcia sił pochodzących od wielu atomów. Łatwo sobie wyobrazić koncepcję budowy pseudoelementu zawierającego więcej niż dwa lub trzy atomy, np. kubicznego czy heksagonalnego, w którym można byłoby uwzględnić dokładniej efekty bardzo złożonych oddziaływań międzyatomowych uwzględniających np. wymianę elektronów, ekranowanie itp.
4. Przegląd literatury nie zawiera odwołań do publikacji w Internecie, często zawierających znacznie nowsze informacje niż te które są dostępne w czasopiśmie i monografiach.
5. Potencjał Stilingera – Webera (wzory 3.10 – 3.14), stanowiący podstawę większości obliczeń Autora, zawiera szereg stałych (A, B, p, q, a ) których dobór może w istotny sposób wpływać na wyniki. Brak jest analizy wpływu tych parametrów na obliczenia oraz opisu sposobu określania ich wartości.
6. Brak jest danych do testu omawianego na str. 52 (chodzi o wymiary, warunki brzegowe, obciążenie).

### 3. Uwagi szczegółowe.

strona, nr wiersza: + od góry, - od dołu:

- 5, +2 co znaczy rząd 1000 x 1000 x 1000 x 3D atomów?
- 10 -1 co to są wiązania delokalizujące elektrony?
- 15 +10 winno być 10 do potęgi 10
- 20 +1 co to jest HF?
- 35, rys. 3.1 – nie opisana oś pozioma
- 35 Sprawa wielu różnych oznaczeń energii – na rys. 3.1  $U(r)$ , na str. 36 wzór 3.1  $E(r)$ , na str. 38 – grecka litera  $\phi$ , na str. 39 i 61 - v, f itd.
- 38 Co to są  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  we wzorze 3.4? Skrót MEAM wyjaśniony dopiero na str. 40 (Modified Embedded Atom Method)
- 40 Odległości oznaczane raz przez R, gdzie indziej przez r
- 63 +3 Czy chodzi o rozkład materiału zadany czy uzyskany w wyniku obliczeń?
- 68 Co oznaczają kolory na rys. 5.8 ?

dość liczne literówki lub pominięte wyrazy, np. na stronach 13 -10, 14 +5, 32, 40, 45, 46, 55, 61, 62, 82

błędy stylistyczne – str. 35, 37, 58, 59, 72

### 3. Podsumowanie.

Uwagi krytyczne, zarówno ogólne jak i szczegółowe, nie umniejszają zasadniczo wartości przedstawionej rozprawy doktorskiej. Zawiera ona szereg ważnych i nowych wyników uzyskanych przez Autora w trakcie kilkuletniej pracy badawczej. Istotną wagę mają praktyczne aspekty badań związane z opracowanym oprogramowaniem. Ponownie należy podkreślić nowoczesność tematyki rozprawy.

Uważam, że praca spełnia wymagania Ustawy o stopniach i tytule naukowym i może być przedmiotem publicznej obrony.

*N. Goswami*