

Autoreferat

1. Paweł Scharoch

2. Posiadane dyplomy

1980 – Dyplom *Magistra Inżyniera Podstawowych Problemów Techniki*, uzyskany w Politechnice Wrocławskiej, na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki.

1986 – tytuł *Doktora Nauk Fizycznych*, uzyskany w Politechnice Wrocławskiej, na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki w ramach studiów doktoranckich. Temat pracy: *Wydajność kwantowa wewnętrznego efektu fotoelektrycznego w półprzewodnikach z wąską przerwą energetyczną.*

3. Historia zatrudnienia

Obecnie, od października 1991 r.

POLITECHNIKA WROCŁAWSKA, WYDZIAŁ PODSTAWOWYCH PROBLEMÓW TECHNIKI; adiunkt w zespole Teorii Fizyki Fazy Skondensowanej (obecnie Katedra Fizyki Teoretycznej);

Od maja 2008 r. do 31.06.2015 r.

CENTRUM BADAWCZO-ROZWOJOWE TELEKOMUNIKACJI POLSKIEJ S.A. (OBECNIE ORANGE LABS), 1/2 etatu; Główny Specjalista w Zakładzie Badawczym.

Od października 2001 r. do stycznia 2002 r.

INSTYTUT FRITZ-HABER, DEPARTAMENT TEORII, BERLIN – staż naukowy.

Od października 1995 r. do marca 2000 r.

INSTYTUT ŁĄCZNOŚCI, ODDZ. WE WROCŁAWIU – 1/3 etatu.

Od maja 1985 r. do grudnia 1991 r.

INSTYTUT ŁĄCZNOŚCI, ODDZ. WE WROCŁAWIU – adiunkt w Pracowni Narazań Elektromagnetycznych.

Od lutego 1987 r. do grudnia 1988 r.

UNIWERSYTET DURHAM, WIELKA BRYTANIA – staż postdoktorski w zespole Teorii Fizyki Półprzewodników.

4. Osiągnięcia naukowe w ramach tematu objętego rozprawą habilitacyjną: „*Studia obliczeniowe ‘ab initio’ właściwości strukturalnych, elastycznych i elektronowych wybranych układów półprzewodnikowych*”

Mieszane układy półprzewodnikowe były przedmiotem zainteresowania naukowców i technologów niemal od początku rozwoju fizyki półprzewodników, jednak od ponad 2 dziesięcioleci są przedmiotem szczególnie intensywnych badań stymulowanych

interesującymi z punktu widzenia zastosowań właściwościami tych materiałów oraz rozwojem nowoczesnych technologii. Przedmiotem zainteresowania są w pierwszej kolejności parametry strukturalne (np. sieć krystaliczna, dystrybucja atomów w układzie mieszanym), charakterystyki elastyczne i elektronowe (struktura pasmowa) ponieważ od nich zależą liczne możliwości aplikacyjne, np. w optoelektronice. Parametry te są silnie powiązane ze sobą, np. naprężenia czy rozmieszczenie atomów wpływają na strukturę elektronową, rozmieszczenie atomów wpływa na właściwości elastyczne itp. W tym kontekście istotną rolę w rozwój dziedziny upatruje się w badaniach teoretycznych z zasad pierwszych, dzięki możliwości **ilościowego przewidywania** szeroko rozumianych charakterystyk fizycznych układów atomowych. Obliczenia *ab initio* są o wiele tańsze i szybsze od eksperymentów rzeczywistych, pozwalają na zbadanie opisanych wyżej właściwości układów hipotetycznych i wskazanie kierunków badań eksperymentalnych.

Przedstawioną wyżej tematyką (w aspekcie badań teoretycznych *ab initio*, będącym przedmiotem wniosku habilitacyjnego), zainteresowałem się ok. 5 lat temu. W ciągu pierwszych 3 lat badania obliczeniowe prowadzone były w ramach realizacji 4 prac magisterskich. Zdobyte wówczas doświadczenia pozwoliły nawiązać współpracę z grupą kierowaną przez Dr hab. Roberta Kudrawca z Laboratorium Optycznej Spektroskopii Nanostruktur (LOSN) przy Katedrze Fizyki Doświadczalnej (Wydział Podstawowych Problemów Techniki, Politechnika Wrocławska). Współpraca zaowocowała 4 artykułami opublikowanymi w ciągu ostatniego roku, będzie kontynuowana i rozszerzana na różne aspekty fizyki układów półprzewodnikowych.

Poniżej przedstawiłem krótką charakterystykę 11 artykułów zawierających wyniki badań obliczeniowych *ab initio* bądź prowadzonych pod moim kierunkiem lub w których aktywnie uczestniczyłem, a także szczegółową charakterystykę mojego w nich wkładu.

H1). Winiarski, M.J., Polak, M., Scharoch, P.
Anomalous band-gap bowing of $AlN_{1-x}P_x$ alloy
(2013) *Journal of Alloys and Compounds*, 575, pp. 158-161.

Jest to pierwsza z serii prac poświęconych badaniu właściwości strukturalnych i elektronowym mieszanym układów półprzewodnikowych z wykorzystaniem obliczeń dużej skali z zasad pierwszych (*ab initio*). Projektowi przyświecało kilka celów, przede wszystkim wykorzystanie największego atutu metod *ab initio*, a mianowicie zdolności przewidywania właściwości, gdyż według wiedzy autorów badany materiał nie był jeszcze syntezowany. Celem nadrzędnym więc było zbadanie właściwości hipotetycznego stopu $AlN_{1-x}P_x$ w strukturze blendy cynkowej. Celem ubocznym było przetestowanie narzędzi i metodologii stosowanych w tego rodzaju obliczeniach, w szczególności znanego od niedawna funkcjonału energii korelacji-wymiany MBJLDA (*Modified Becke Jonson Local Density Approximation*), który, jak pokazano w licznych publikacjach, pozwala na uzyskanie zgodnych z eksperymentem przerw energetycznych. W zakresie metodologii zastosowano dwa podejścia, metodę superkomórki (SC–*supercell*) oraz metodę mieszania alchemicznego (AM–*alchemical mixing*). Metoda superkomórkowa polega na zastosowaniu dużych komórek będących wielokrotnością komórki prymitywnej. Na przykład w strukturze blendy cynkowej (ZB) związku macierzyste AlN i AlP zawierają dwa atomy w komórce prymitywnej. Superkomórka o 2-krotnie dłuższych wektorach sieciowych zawiera 8 komórek prymitywnych czyli 16 atomów, z czego 8 Al i 8 N lub P. Obliczenia dla takiego układu są już wymagające, jednak mieszczą się w rozsądnych granicach wymagań sprzętowych, a jednocześnie pozwalają na

modelowanie stopu o składach zmieniających się co 1/8, czyli 12.5%, jak również na badanie tendencji zależności właściwości od konfiguracji atomów (rozproszona vs. sklastrowana). W przybliżeniu mieszania alchemicznego (AM – *alchemical mixing*) (nieco mylnie nazywanym przybliżeniem kryształu wirtualnego – VCA, co zostanie uzasadnione przy jednym z kolejnych artykułów) w komórce prymitywnej (2 atomy) w miejsce anionu umieszcza się pseudopotencjał będący specjalnie skonstruowaną superpozycją pseudopotencjałów dwóch atomów (N/P), w proporcjach odpowiadających składowi (szczegóły dotyczące konstrukcji takiego pseudopotencjału opisano w artykule). Metoda ta jest znacznie efektywniejsza od metody SC gdyż obliczenia wykonywane są na komórce prymitywnej, jednak dużo mniej wiarygodna, jak pokazano zarówno w omawianym jak i kolejnych artykułach.

Uzyskano kilka interesujących wyników. Zależność stałej sieci od składu obliczona metodą SC spełnia prawo Vegarda (zależność liniowa), jednak ta sama zależność obliczona metodą AM wykazuje dużą łukowatość (Rys.1). Jest to artefakt metody obliczeniowej, którego przyczyny przeanalizowano w pracy (H4). Stwierdzono silny wpływ konfiguracji atomów w superkomórce na przerwę wzbronioną, w szczególności anomalnie dużą łukowatość (*bowing*) w konfiguracji sklastrowanej ze zoptymalizowaną geometrią (Rys.6). Podobnie jak w przypadku stałej sieci występuje duża rozbieżność między wynikami metody SC i AM.

Wszystkie obliczenia, zarówno w tym projekcie, jak i poniższych wykonano z wykorzystaniem pakietu ABINIT, we Wrocławskim Centrum Sieciowo Superkomputerowym.

Mój wkład w omawiany projekt szacuję na **30%**. Polegał on na projektowaniu obliczeń, interpretacji wyników oraz współredagowaniu artykułu.

H2). Scharoch, P., Winiarski, M.

An efficient method of DFT/LDA band-gap correction

(2013) Computer Physics Communications, 184 (12), pp. 2680-2683.

W obliczeniach *ab initio* struktury elektronowej kryształów występuje znany problem zaniżania wartości przerwy wzbronionej (*the band-gap problem*) przez przybliżenia LDA (*Local Density Approximation*) i GGA (*Generalized Gradient Approximation*) funkcjonału energii korelacji wymiany. Związany jest on z cechą wypukłości tych funkcjonałów ze względu na ułamkową zmianę liczby elektronów w układzie (dyskusja tego efektu zawarta jest w artykule). Wiadomo jednak, że dla układów skończonych z dobrym przybliżeniem można uzyskać wartość przerwy fundamentalnej metodą różnicy energii samouzgodnionych dla stanu wzbudzonego i podstawowego ($\Delta(SCF)$, *SCF – Self Consistent Field*). Zastosowanie metody $\Delta(SCF)$ w układzie nieskończonym jest z zasady niemożliwe gdyż z jednej strony wzbudzenie pojedynczego elektronu prowadzi do infinitezymalnie małej zmiany energii (co wraz z wypukłością przybliżeń funkcjonałów jest właśnie przyczyną zaniżania przerwy), a z drugiej strony wzbudzenie jednego elektronu na komórkę elementarną prowadziłoby do niefizycznie dużych wzbudzonych gęstości i jest technicznie niewykonalne w obliczeniach. Program ABINIT umożliwia stosowanie obsadzeń ułamkowych, powstała więc idea aby stan wzbudzony skonstruować z ułamkowych obsadzeń z rozkładem Gaussa centrowanym np. na punkcie Γ w strefie Brillouina (dla prostej przerwy). Energie stanów wzbudzonych można wówczas obliczać dla małych wzbudzeń o zmiennej wartości, a następnie ekstrapolować je do wzbudzenia odpowiadającego 1 elektronowi na komórkę elementarną. Energia całkowita w obliczeniach normowana jest do komórki elementarnej dlatego przerwę energetyczną można

uzyskać jako różnicę energii stanu wzbudzonego (1 elektron na komórkę) i podstawowego. W metodzie pojawia się parametr, szerokość połówkowa funkcji Gaussa (σ_k), który można potraktować jako parametr dopasowania do eksperymentu, ponieważ wartość obliczanej przerwy zależy od wartości tego parametru. Fakt ten wykorzystano do konstrukcji metod korekty przerwy wzbronionej. W literaturze pokazano, że w układzie nieskończonym efekt wypukłości funkcjonalów może zostać zniwelowany poprzez lokalizację w przestrzeni r wzbudzonego stanu elektronowego. W kontekście omawianej pracy zaproponowano metodę takiej lokalizacji.

W pracy uzyskano następujące wyniki. Stwierdzono, że dla małych wzbudzeń energia całkowita zmienia się liniowo z wartością wzbudzonego ładunku; udowodniono formalnie i w drodze obliczeń, że metoda $\Delta(SCF)$ jest równoważna metodzie $\Delta(EIG)$ polegającej na uśrednieniu różnic energii Kohna-Shama próbkowanych z takim samym rozkładem jak w metodzie $\Delta(SCF)$; pokazano, że istnieje korelacja pomiędzy parametrem σ_k dla poprawnej przerwy a przerwą eksperymentalną (choć wiadomo, że nie istnieje taka korelacja pomiędzy przerwą LDA/GGA a przerwą eksperymentalną), i na tej podstawie zaproponowano dwie metody wyznaczania E_g w nieznanym układzie, jedna z nich polega na zastosowaniu liniowej zależności parametru σ_k od składu w układzie mieszanym a druga, nazwana „półempiryczną”, na poszukiwaniu punktu przecięcia wyznaczonej z obliczeń przerwy wzbronionej jako funkcji σ_k z uniwersalną zależnością $E_g(\sigma_k)$.

Artykuł został uznany w Instytucie Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu za jedno z najważniejszych osiągnięć w 2013 roku.

Mój wkład w projekt polegał na sformułowaniu idei, opracowaniu podstaw teoretycznych metody, dowodzie równoważności metody $\Delta(SCF)$ i $\Delta(EIG)$, w oparciu o twierdzenie Janaka, wykonaniu części obliczeń numerycznych, zaproponowaniu jednej z metod wyznaczania przerwy (półempirycznej), zaproponowaniu metody lokalizacji stanu wzbudzonego w przestrzeni rzeczywistej, napisaniu manuskryptu artykułu. Mój wkład szacuję na **60%**.

H3). Scharoch, P., Winiarski, M.J., Polak, M.P.

Ab initio study of $In_xGa_{1-x}N$ - Performance of the alchemical mixing approximation
(2014) Computational Materials Science, 81, pp. 358-365.

Artykuł zawiera opis obszernych badań obliczeniowych układu $In_xGa_{1-x}N$ metodą mieszania alchemicznego pseudopotencjałów (AM) (* – patrz przypis), w tym właściwości strukturalnych, elastycznych i elektronowych. Jednym z celów, oprócz zbadania właściwości układu (częściowo dotychczas nieznanych, jak stałe elastyczne w strukturze ZB), było zbadanie wiarygodności przybliżenia AM oraz ewentualnych przyczyn rozbieżności wyników uzyskiwanych tą metodą i metodą superkomórek. W artykule zebrano liczne dane literaturowe badanych wielkości, celem porównania z uzyskanymi wynikami obliczeń.

Praca miała w dużej mierze charakter techniczny (gruntowne poznanie warsztatu badawczego, testowanie przybliżeń, np. do wyznaczania przerwy wzbronionej zastosowano zaproponowany niedawno w literaturze funkcjonal MBJLDA). Istotnym osiągnięciem pracy było pokazanie, że przybliżenie AM prowadzi do akceptowalnych wyników dla stałych elastycznych, natomiast występują niefizyczne łukowatości stałej sieci i przerwy wzbronionej. Udowodniono, poprzez analizę rzutowanych gęstości stanów w przybliżeniach AM i SC, że łukowatości te spowodowane są głównie brakiem lokalnej relaksacji atomów w przybliżeniu AM, w którym atomy zajmują zawsze położenia o wysokiej symetrii komórki prymitywnej

ZB. Fakt ten stał się inspiracją dla zaproponowanej w późniejszych pracach metody SC/AM będącej połączeniem przybliżenia AM z superkomórką.

Mój wkład w projekt polegał na zaproponowaniu tematu, udziale w obliczeniach, pozyskaniu licznych danych z literatury do porównania z wynikami obliczeń, wyjaśnieniu przyczyn błędów przybliżenia AM, zredagowaniu artykułu. Szacuję mój wkład na **50%**.

*) w artykule stosowano nazwę przybliżenie kryształu wirtualnego (VCA), którą często stosuje się w literaturze, jednak w późniejszych pracach, opisanych poniżej, okazało się, że skrót VCA używa się także w nieco innym kontekście, zbliżonym do jego historycznie oryginalnego znaczenia, na gruncie przybliżenia jednocząstkowego i pseudopotencjałów empirycznych. Dlatego w następnych pracach zdecydowaliśmy o zmianie nazwy na *Alchemical Mixing* (AM), zaproponowanej przez autorów pakietu ABINIT, i nazwę tę konsekwentnie stosuję w niniejszym autoreferacie.

H4). Winiarski, M.J., Scharoch, P., Polak, M.P.

First principles prediction of structural and electronic properties of $Tl_xIn_{1-x}N$ alloy

(2014) Journal of Alloys and Compounds, 613, pp. 33-36.

Praca była próbą zbadania właściwości elektronowych nie zbadanego dotychczas doświadczalnie materiału $Tl_xIn_{1-x}N$. Dzięki zastosowaniu funkcjonału MBJLDA oraz w pełni relatywistycznych pseudopotencjałów możliwe było realistyczne przewidzenie struktury elektronowej. Najistotniejszy wynik przedstawiono w artykule na Rys.5, gdzie widać liniowy spadek przerwy wzbronionej z zawartością TlN (od wartości ok. $0.7eV$) oraz szybki wzrost (od wartości bliskiej zero) rozszczepienia spin-orbita (SOS – *spin-orbit splitting*). Przy składzie $x=0.25$ przerwa wzbroniona zbliża się do zera a SOS stabilizuje się na wartości ok. $1.4eV$. Możliwość uzyskiwania różnych E_g i SOS poprzez zmiany składu powoduje, że materiał jest interesujący z punktu widzenia zastosowań optoelektronicznych (m.in. możliwość eliminacji rekombinacji typu Auger).

Mój wkład w pracę polegał na interpretacji wyników i współredagowaniu artykułu. Szacuję go na **20%**.

H5). Polak, M.P., Scharoch, P., Kudrawiec, R., Kopaczek, J., Winiarski, M.J., Linhart,

W.M., Rajpalke, M.K., Yu, K.M., Jones, T.S., Ashwin, M.J., Veal, T.D.

Theoretical and experimental studies of electronic band structure for $GaSb_{1-x}Bi_x$ in the dilute Bi regime

(2014) Journal of Physics D: Applied Physics, 47 (35).

Jest to pierwszy spośród serii artykułów, który powstał przy współpracy z grupą kierowaną przez Dr hab. Roberta Kudrawca z Laboratorium Optycznej Spektroskopii Nanostruktur (LOSN) przy Katedrze Fizyki Doświadczalnej (Wydział Podstawowych Problemów Techniki, Politechnika Wroclawska). Wkład do publikacji polegał na opracowaniu jej teoretycznej części. Metodami obliczeń dużej skali *ab initio* zbadano zależność struktury pasmowej układu $GaSb_{1-x}Bi_x$ od zawartości Bi (w reżimie niewielkich składów Bi , do 5%), w szczególności zależności położenia wierzchołków pasm w punkcie Γ (przewodnictwa, dziur ciężkich i lekkich oraz pasma spin-orbita), a stąd także przerwy wzbronionej. Celem było porównanie przerwy wzbronionej z wynikami badań eksperymentalnych wykonanych w LOSN metodą spektroskopii fotoodbiciowej, i uzyskanie z obliczeń dodatkowych informacji zwłaszcza dotyczących bezwzględnych przesunięć pasm (offsetów), istotnych z punktu widzenia zastosowań. W obliczeniach zastosowano reprezentację fal płaskich rozszerzonych o

projektorzy (PAW – *Projector Augmented Waves*) do relaksacji geometrii układu oraz pseudopotencjały typu HGH (*Hartwigsen, Goedecker i Hutter*) w połączeniu z funkcjonałem MBJLDA energii korelacji wymiany do obliczeń struktury pasmowej, co pozwoliło na uwzględnienie efektów relatywistycznych. Ponadto wykorzystano dwie oryginalne (wg wiedzy autorów) metody: mieszania alchemicznego dla pojedynczego atomu w superkomórce (nazwaną SC-AM), oraz metodę cechowania energii *ab initio* polegająca na uzgadnianiu wartości potencjału Kohna-Shama w punkcie superkomórki odległym od atomu domieszki *Bi* (metodę opisano szczegółowo w artykule (H8)). Obliczenia wykonywano na superkomórce 16-atomowej z jednym atomem alchemicznym *Sb/Bi*, co pozwoliło na uzyskanie ciągłej zmiany składu w zakresie 0-12.5%. Uzyskano bardzo dobrą zgodność wyników obliczeń z eksperymentem oraz, wnioskując z dyskusji danych literaturowych, wiarygodne wyniki dotyczące istotnych dla aplikacji zależności offsetów pasm od składu *Bi*. Ważnym wynikiem było pokazanie, że wprowadzenie bizmutu do układu modyfikuje zarówno pasmo przewodnictwa jak i walencyjne (Rys.5), mianowicie obniża dno pasma przewodnictwa (-26meV/%Bi) oraz podwyższa wierzchołek pasma walencyjnego (9.6meV/%Bi). Jest to istotny wkład w ciągle trwającą w literaturze dyskusję nt. wpływu domieszki *Bi* na pasma półprzewodników III-V.

W badania teoretyczne^{*)} (obliczenia *ab initio*) zaangażowane były 3 osoby, oprócz mnie Maciej Polak i Maciej Winiarski. Mój wkład w część teoretyczną polegał na współudziale w projektowaniu metodologii obliczeń, zaproponowaniu nowych metod (SC-AM oraz metody cechowania energii), nadzorze merytorycznym nad obliczeniami, dyskusji wyników oraz współredagowaniu części teoretycznej artykułu. Szacuję go na **40%**.

*) Projekt realizowany pod kierunkiem dr hab. Roberta Kudrawca, obejmował wytworzenie próbek (przy współpracy z partnerem zagranicznym), pomiary spektroskopowe oraz obliczenia teoretyczne. Wkład części teoretycznej *ab initio* w powstanie pracy szacuję na **33%**.

H6). Kudrawiec, R., Kopaczek, J., Polak, M.P., Scharoch, P., Gladysiewicz, M., Misiewicz, J., Richards, R.D., Bastiman, F., David, J.P.R.

Experimental and theoretical studies of band gap alignment in GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs quantum wells

(2014) Journal of Applied Physics, 116 (23).

Kolejnym badanym układem z grupy półprzewodników III-V rozrzedzanych bizmutem był *GaAs_{1-x}Bi_x*. Podobnie jak w przypadku pracy (H5) narzędziem eksperymentalnym była spektroskopia fotoodbiciowa, tym razem jednak zastosowana do układu studni kwantowych *GaAs_{1-x}Bi_x/GaAs*. Dzięki temu oprócz przejścia podstawowego VB-CB obserwowano przejścia pomiędzy drugimi poziomami w studni dla VB i CB. Tego typu dane doświadczalne, w połączeniu ze znajomością parametrów geometrycznych studni, pozwalają na wyznaczenie położenia przerwy energetycznej w układzie rozrzedzonym *Bi* (*GaAs_{1-x}Bi_x*) względem przerwy czystego *GaAs* (*the band gap alignment*), czyli offsetów pasm.

Metodologia obliczeń *ab initio* była podobna do opisanej w pracy (H5), jednak zastosowano tu superkomórkę 54-atomową (3x3x3 komórki prymitywne), najpierw z jednym atomem alchemicznym *As/Bi* (do składu 3.7%) a następnie z jednym atomem *Bi* i jednym atomem alchemicznym (składy 3.7-7.4%). Dzięki zastosowanej konfiguracji mierzonego układu (studnia kwantowa) możliwe było bezpośrednie porównanie offsetów pasm uzyskanych z obliczeń i pomiarów. Uzyskano bardzo dobrą zgodność wyników (Rys.9) co ponownie potwierdziło poprawność zaproponowanej przeze mnie metody wyznaczania zmiany położenia pasm pod wpływem dodatku obcego atomu (rozrzedzenia). Istotnym jakościowo i

ilościowo wynikiem było pokazanie, że łukowatość przerwy energetycznej pochodzi z łukowatości offsetu wierzchołka VB (od $51-20\text{meV}/\%Bi$), przy liniowej zależności offsetu dna CB ($-33\text{meV}/\%Bi$), dla składów w zakresie $0-7.4\%$.

W badania teoretyczne *ab initio* zaangażowane były 2 osoby, ja oraz Maciej Polak. Mój wkład miał głównie charakter merytoryczny, polegał na udziale w projektowaniu metodologii obliczeń, autorstwie zastosowanych metod: SC-AM oraz cechowania energii, nadzorze merytorycznym nad obliczeniami, dyskusji wyników oraz współredagowaniu części teoretycznej artykułu. Mój wkład w część teoretyczną szacuję na **40%**.

*) Projekt realizowany pod kierunkiem dr hab. Roberta Kudrawca, obejmował wytworzenie próbek (przy współpracy z partnerem zagranicznym), pomiary spektroskopowe oraz obliczenia teoretyczne. Wkład części teoretycznej *ab initio* w powstanie pracy szacuję na **33%**.

H7). Kopaczek, J., Kudrawiec, R., Polak, M.P., Scharoch, P., Birkett, M., Veal, T.D., Wang, K., Gu, Y., Gong, Q., Wang, S.
Contactless electroreflectance and theoretical studies of band gap and spin-orbit splitting in $InP_{1-x}Bi_x$ dilute bismide with $x \leq 0.034$
(2014) Applied Physics Letters, 105 (22)

Podobnie jak w pracach (H5) i (H6) badano eksperymentalnie i teoretycznie właściwości elektronowe półprzewodnika III-V rozcieńczonego bizmutem, w tym wypadku *InP*. Dzięki zastosowanej technice eksperymentalnej, bezkontaktowego elektroodbicia (*contactless electroreflectance*), oprócz przerwy energetycznej możliwe było zbadanie po raz pierwszy zależności rozszczepienia spin-orbita od zawartości *Bi*. W obliczeniach *ab initio* zastosowano metodologię opisaną w punkcie (H5), z 54-atomową superkomórką i 1 atomem alchemicznym *P/Bi* (składy do 3.7%). Uzyskano bardzo dobrą zgodność wyników teoretycznych i eksperymentalnych (Rys.2), w tym także rozszczepienia spin-orbita.

W badania teoretyczne *ab initio* zaangażowane były 2 osoby, ja oraz Maciej Polak. Mój wkład w powstanie pracy^{*)} miał charakter merytoryczny, polegał na udziale w projektowaniu metodologii obliczeń, autorstwie zastosowanych metod: SC-AM oraz cechowania energii, nadzorze merytorycznym nad obliczeniami oraz współredagowaniu części teoretycznej artykułu. Mój wkład w część teoretyczną szacuję na **40%**.

*) Projekt realizowany pod kierunkiem dr hab. Roberta Kudrawca, obejmował wytworzenie próbek (przy współpracy z partnerem zagranicznym), pomiary spektroskopowe oraz obliczenia teoretyczne. W badania teoretyczne (obliczenia *ab initio*) zaangażowane były 2 osoby, oprócz mnie Maciej Polak. Wkład części teoretycznej *ab initio* w powstanie pracy szacuję na **33%**.

H8). Polak, M.P., Scharoch, P., Kudrawiec, R.
First-principles calculations of bismuth induced changes in the band structure of dilute Ga-V-Bi and In-V-Bi alloys: chemical trends versus experimental data
(2015) Semicond. Sci. Technol. 30 (2015) 094001

Praca jest opartym na obliczeniach *ab initio* studium porównawczym wpływu domieszki *Bi* na właściwości elektronowe stopów półprzewodnikowych typu *Ga-V-Bi* oraz *In-V-Bi*. Wyniki obliczeń porównano w licznych danych eksperymentalnych dostępnymi w literaturze. Głównym celem była zbadanie trendów chemicznych zachowania podstawowych parametrów istotnych z punktu widzenia zastosowań w optoelektronice, jak przerwa wzbroniona, offsety

pasem, czy wartość rozszczepienia spin-orbita. Jednocześnie zbadano jakość stosowanych powszechnie przybliżeń dla struktury pasmowej stopów, czyli przybliżenia kryształu wirtualnego (VCA) oraz modelu BAC (*band anticrossing*). Zastosowano metodologię podobną do opisanej w punktach (H5)-(H7), z jednym istotnym nowym elementem, a mianowicie wygenerowane zostały w pełni relatywistyczne pseudopotencjały zachowujące normę, z wykorzystaniem pakietu APE (*Atomic Pseudopotential Engine*), przy czym do celów relaksacji struktur pseudopotencjały generowane były z zastosowaniem funkcjonału LDA (*Perdew-Wang*), a do celów obliczeń struktury pasmowej z funkcjonałem MBJLDA. W artykule opisano szczegółowo metodę cechowania energii. Opracowano bardzo precyzyjne metody relaksacji struktur oraz doboru parametru „C” dla funkcjonału MBJLDA. Superkomórka 54-atomowa z jednym atomem alchemicznym pozwoliła na zbadanie struktur do 3.7% zawartości bizmutu, w przybliżeniu SC-AM. Przebadano 6 związków: $GaP_{1-x}Bi_x$, $GaAs_{1-x}Bi_x$, $GaSb_{1-x}Bi_x$, $InP_{1-x}Bi_x$, $InAs_{1-x}Bi_x$, i $InSb_{1-x}Bi_x$, uzyskując bardzo dobrą zgodność z dostępnymi danymi eksperymentalnymi. Spójne metodologicznie obliczenia, zweryfikowane danymi doświadczalnymi, pozwoliły na sformułowanie wniosków dotyczących trendów chemicznych, bardzo istotnych z punktu widzenia projektowania układów dla zastosowań optoelektronicznych. Pokazano także ograniczenia stosowalności przybliżeń VCA i BAC.

Artykuł otrzymał bardzo dobre recenzje w czasopiśmie *Semiconductor Science and Technology*.

Mój wkład polegał na współdziałaniu w projektowaniu metodologii obliczeń, autorstwie metod: SC-AM oraz cechowania energii, udziale w interpretacji wyników oraz współredagowaniu artykułu. Szacuję mój wkład na **35%**.

H9). Zelazna, K., Polak, M.P., Scharoch, P., Serafinczuk J., Gładysiewicz, M., Misiewicz, J., Dekoster, J., and Kudrawiec, R.

Electronic band structure of compressively strained $Ge_{1-x}Sn_x$ with $x < 0.11$ studied by contactless electroreflectance

(2015) *Appl. Phys. Lett.* **106**, 142102

Stopy $Ge_{1-x}Sn_x$ są w ostatnich latach przedmiotem intensywnych badań ze względu na właściwości pożądane w zastosowaniach optoelektronicznych. Okazuje się bowiem, że domieszki Sn w czystym germanie powodują korzystne zmiany właściwości elektronowych, jak zwiększenie ruchliwości nośników czy zmianę charakteru przerwy wzbronionej ze skośnej na prostą. Poznanie tych właściwości jest sprawą kluczową dla zastosowań i ciągle tematem otwartym. Jednym z bardzo ważnych aspektów jest wpływ na strukturę elektronową wbudowanego ściskającego naprężenia, które powstaje w warstwach epitaksjalnych $Ge_{1-x}Sn_x$ na czystym germanie. W Laboratorium Optycznej Spektroskopii Nanostruktur (LOSN) na Politechnice Wrocławskiej wykonano pomiary spektroskopowe widm metodą bezkontaktowego elektroodbicia (CER), które pozwoliły na określenie energii przejść optycznych z pasm dziur lekkich, ciężkich i spin-orbita, w szczególności wpływu na te energie wbudowanego naprężenia. Pomiary wykonywano na próbkach o różnych zawartościach Sn, do ok. 10%. Wyniki eksperymentalne zostały porównane z obliczeniami teoretycznymi *ab initio*.

W obliczeniach *ab initio*, zastosowano 54-atomowe superkomórki, w których atomy Ge zastępowano atomami Sn, od 1 do 6, uzyskując składy 0-11%. Zastosowana metodologia była podobna do opisanej w punktach (H5)-(H8). Użyto reprezentacji typu PAW do relaksacji struktury oraz pseudopotencjały HGH w połączeniu z funkcjonałem MBJLDA do

wyznaczania struktury pasmowej. Nowym elementem był precyzyjny dobór parametru „C” funkcjonału MBJLDA oraz stałych sieci dla Ge , tak by idealnie odtwarzały znaną strukturę pasmową. Dla układu mieszanego wartości te brano z liniowej interpolacji pomiędzy Ge i Sn . Napisany został specjalny program do znajdowania konfiguracji rozproszonej atomów Sn . Ze względu na duże wymagania sprzętowe obliczenia wykonywane były dla komórek kubicznych zrelaksowanych, a wartości dla układu z dwuosiowym naprężeniem uzyskiwano z teorii Bira-Pikusa.

Uzyskano bardzo dobrą zgodność wyników obliczeń z danymi doświadczalnymi, w szczególności parametry łukowatości przerw energetycznych HH-CB, LH-CB, SO-CB, mieszczące się w zakresach znanych z literatury.

W badania teoretyczne (obliczenia *ab initio*) zaangażowane były 2 osoby, ja oraz Maciej Polak. W tym projekcie byłem głównym wykonawcą obliczeń, w dużej części pomysłodawcą stosowanej metodologii, brałem udział w interpretacji wyników oraz zredagowałem część artykułu dotyczącą obliczeń *ab initio*. Mój wkład w obliczenia teoretyczne szacuję na **60%**.

*) Projekt realizowany pod kierunkiem dr hab. Roberta Kudrawca, obejmował wytworzenie próbek (przy współpracy z partnerem zagranicznym), pomiary spektroskopowe oraz obliczenia teoretyczne. Wkład części teoretycznej *ab initio* w powstanie pracy szacuję na **33%**.

Promotorstwo prac dyplomowych w ramach tematyki objętej rozprawą habilitacyjną

- 1) Paweł Szczepkowski, *Badania ab initio podstawowych właściwości strukturalnych stopów typu $In_xAl_{1-x}N$ metodą konstrukcji superkomórki*, praca magisterska (2011).

Praca, w której wykonano pierwsze próby obliczeń *ab initio* dla stopu półprzewodnikowego metodą superkomórek. Badano podstawowe właściwości strukturalne i elektronowe.

- 2) Krzysztof Kołodziejcki, *Ab initio calculations of deformation potentials in $In_xGa_{1-x}N$ within the coherent potential approximation*, praca magisterska (2012).

Praca była próbą rozpoznania możliwości zastosowania przybliżenia potencjału koherentnego (CPA). Z powodu trudności technicznych metoda ta jednak nie została zastosowana. Autor skupił się na przetestowaniu możliwości metody opisanej w artykule (H2)

- 3) Jakub Nowak, *Wpływ temperatury na segregację indu w stopach $In_xAl_{x-1}N$ – obliczenia ab initio*, praca magisterska (2012).

Praca była próbą podjęcia analizy termodynamicznej mieszalności w stopach półprzewodnikowych na przykładzie $In_xAl_{x-1}N$. Uzyskano interesujące wyniki, które stały się inspiracją dla skonstruowania uproszczonej metody analizy mieszalności z zasad pierwszych. Temat mieszalności oczekuje na realizację.

- 4) Maciej Polak, *Studia ab initio właściwości materiałowych i elektronowych wybranych układów mieszanych związków półprzewodnikowych III-V*, projekt inżynierski, (2013).

W pracy wykonano obliczenia parametrów strukturalnych, elastycznych i elektronowych hipotetycznego stopu półprzewodnikowego $AlN_{1-x}P_x$, z wykorzystaniem

najnowocześniejszych dostępnych metod, i różnych przybliżeń. Zdobyte doświadczenia wykorzystano w projektach opisanych w artykułach (H1), (H3)-(H8).

- 5) Tomasz Woźniak, *Obliczenia ab initio struktury geometrycznej i elektronowej monowarstw wybranych dichalkogenków metali przejściowych grupy VI*, projekt inżynierski, (2014).

Praca była w dużej mierze udaną próbą zastosowania metodologii opisanych w artykułach (H1), (H3)-(H8) do zbadania właściwości strukturalnych i elektronowych monowarstw wybranych dichalkogenków metali przejściowych grupy VI (typu MoS_2).

- 6) Krzysztof Wittek, *Obliczenia ab initio właściwości strukturalnych i elastycznych kryształów półprzewodnikowych GeSn, GeC oraz SnC*, projekt inżynierski (2014).

W pracy wyznaczono istotne dla praktycznych zastosowań stałe elastyczne dla związków binarnych IV-IV. Porównano wyniki uzyskiwane różnymi metodami (różnic skończonych, DFPT).

Prezentacje na międzynarodowych konferencjach w ramach tematyki objętej rozprawą habilitacyjną

SPIE Conference, Drezno 2013r.

P Scharoch, M Winiarski, M Polak

Semiconductor alloys for optoelectronic applications - 'Ab initio' modeling

(referat: P Scharoch)

Energy Materials and Nanotechnology Conference, Qindao, 15-17 czerwca, 2015.

P Scharoch

Ab initio modeling of semiconductor alloys for nanostructure-based optoelectronic applications

(referat zaproszony)

Workshop on Bismuth Containing Semiconductors, Madison, 19-22 Lipca 2015

P Scharoch, MP Polak, M Gladysiewicz and R Kudrawiec

Ab initio Prediction of Non-Linear Variation of the Band Gap and Spin-Orbit-Splitting in Ge_{1-x}Sn_x and its Comparison with Measurements of Direct Optical transitions in Compressively Strained Ge_{1-x}Sn_x Layers with x<11%

(referat: P Scharoch)

Workshop on Bismuth Containing Semiconductors, Madison, 19-22 Lipca 2015

M Gladysiewicz, M Polak, P Scharoch, M Wartak, R Kudrawiec

Electronic Band Structure and Material Gain of Ga(in)BiAs/GaAs Quantum Wells Grown on GaAs Calculated with 14-band and 8-band kp Model

(referat: M Gladysiewicz)

Workshop on Bismuth Containing Semiconductors, Madison, 19-22 Lipca 2015

MP Polak, P Scharoch and R Kudrawiec

Influence of Bismuth on the Band Structure of Ga-V-Bi and In-V-Bi Dilute Alloys. DFT Compared with Experimental Data

(referat: M Polak)

Compound Semiconductor Week, Santa Barbara, 28.06-2.07 2015

M Gladysiewicz, M Polak, P Scharoch, M Wartak, R Kudrawiec

Theoretical Calculations of Electronic Band Structure and Material Gain of III-V-Bi Quantum Wells Grown on GaAs, InP, and GaSb Substrates

(referat: M Gladysiewicz)

44th International School and Conference on Physics of Semiconductors "Jaszowiec 2015"

T Woźniak, M Winiarski, P Potasz, P Scharoch, A Wójs

'Ab initio' studies of geometrical and electronic structure of monolayers of chosen group-VI transition metal dichalcogenides

(prezentacja plakatowa: T Woźniak)

43 Zjazd Fizyków Polskich – Kielce 2015r.

T Woźniak, P Scharoch

Badania ab initio właściwości strukturalnych i elektronowych wybranych dichalkogenków metali przejściowych grupy VIB

(prezentacja ustna)

5. Pozostałe osiągnięcia naukowo - badawcze.

1) Sieradzki, A., Basta, M., Scharoch, P., Bigot, J.-Y.

Ultrafast Optical Properties of Dense Electron Gas in Silicon Nanostructures

(2014) *Plasmonics*, 9 (3), pp. 545-551.

W pracy badano ultraszybką dynamikę nośników w krzemie poprzez pomiary zależnych od czasu widm odbicia z femtosekundową rozdzielczością. Mój wkład polegał na dyskusji i interpretacji wyników, oraz dużym udziale w redagowaniu artykułu. Szacuję ten wkład na **20%**.

2) Winiarski, M., Scharoch, P.

Ab initio study of basic material properties of Fe, Co, and Ni ferromagnetic crystals

(2010) *Computational Materials Science*, 48 (3), pp. 700-704.

Artykuł w dużej części jest raportem z wyników uzyskanych w trakcie realizowania pod moim kierunkiem przez Macieja Winiarskiego projektu dyplomowego. Obliczenia wykonywano w ramach teorii funkcjonału gęstości spinowej (SDFT – *spin density functional theory*). Badano wpływ uwzględnienia spinu na właściwości strukturalne i elastyczne. Badano także wpływ technicznych aspektów generowania pseudopotencjału (parametry modelu rdzenia) na właściwości magnetyczne. Stwierdzono, że wpływ ten jest bardzo znaczący, do tego stopnia, że niewłaściwa konstrukcja modelu rdzenia prowadzi do zaniku gęstości magnetyzacji i związanych z nią momentów magnetycznych na atomach.

Mój wkład polegał na nadzorze merytorycznym, dyskusji i interpretacji wyników oraz współredagowaniu artykułu. Szacuję ten wkład na **40%**.

3) Scharoch, P.

Ab initio study of the temperature-dependent structural properties of Al(110)

(2009) *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 80 (12).

Praca zawiera propozycję metodologii badania z zasad pierwszych subtelnych temperaturowych efektów strukturalnych. Do analizy wybrano powierzchnię Al(110), gdzie badania eksperymentalne pokazują, że temperaturowa zależność odległości międzywarstwowych silnie zależy od odległości od powierzchni, w szczególności obserwuje się anomalnie duże zwiększanie odległości między warstwami 2-3 przy jednoczesnej kontrakcji odległości 1-2 i prawie braku zmian odległości 3-4. Badania obliczeniowe oparto na założeniu, że zjawisko jest superpozycją 3 efektów: wpływu rozszerzalności cieplnej kryształu litego na powierzchnię, asymetrii potencjału w kierunku prostopadłym do powierzchni, oraz efektu entropowego (zmiany strukturalne związane ze wzrostem entropii). Uwzględnienie ostatniego efektu wymagało zastosowania koncepcji energii powierzchni swobodnej (FES – *Free Energy Surface*), która w istocie jest zastosowaniem przybliżenia kwaziharmonicznego dla powierzchni. Wszystkie efekty zostały zbadane teoretycznie metodą obliczeń *ab initio*. Projekt był bardzo wymagający obliczeniowo a jego realizacja trwała z niewielkimi przerwami 2 lata (4 prezentacje na konferencjach międzynarodowych, w tym dwa referaty). Uwieńczony został sukcesem w postaci bardzo dobrej zgodności wyników z dostępnymi danymi doświadczalnymi.

Praca miała charakter monoautorski (wkład **100%**).

4) Scharoch, P., Peisert, J., Tatarczyk, K.

Thermodynamics of fee Al crystal from first principles - Performance of local density and generalized gradient approximations

(2007) Acta Physica Polonica A, 112 (3), pp. 513-521.

W pracy zastosowano przybliżenie kwaziharmoniczne do analizy termodynamiki kryształu Al z zasad pierwszych. Przybliżenie to polega na wyznaczaniu częstości fononów w funkcji stałej sieci kryształu. Możliwe jest to dzięki faktowi, że przy sztucznym izotropowym naprężeniu kryształu atomy nadal pozostają w położeniach równowagi, mimo, że kryształ jako całość nie jest w równowadze. Wyznaczenie fononów w funkcji stałej sieci pozwala na uzależnienie energii swobodnej od objętości i temperatury, czyli uzyskanie tzw. powierzchni energii swobodnej (FES – *free energy surface*), a tym samym uzależnienie położenia minimum funkcji $F(V)$ od temperatury. W ten sposób uzyskuje się teoretyczną zależność objętości od temperatury (rozszerzalność cieplna). Wyniki tej pracy wykorzystano w opisanym wyżej projekcie (3) (wpływ rozszerzalności cieplnej kryształu litego na powierzchnię). Interesującym wynikiem było porównanie związków dyspersyjnych fononów obliczanych metodą bezpośrednią i z rachunku zaburzeń funkcjonału gęstości (DFPT) i dyskusja przyczyn rozbieżności. Jednym z wniosków pracy jest pokazanie, że rozszerzalność cieplna kryształu nie jest związana z nieliniowością oddziaływań (jak się czasem uważa), ale jest efektem entropowym.

Temat, którego byłem pomysłodawcą, był w dużej części realizowany pod moją opieką przez Krzysztofa Tatarczyka, w ramach projektu dyplomowego. Jednak na potrzeby realizacji projektu (3) wszystkie obliczenia (z wyjątkiem fononów z rachunku zaburzeń DFT) wykonałem sam. Mój wkład szacuję na **40%**.

5) Scharoch, P.

The semiempirical method for finding thermal characteristics of simple crystals

(2004) Acta Physica Polonica A, 106 (4), pp. 487-495.

Interesującym kierunkiem zastosowań metod *ab initio* jest ich łączenie ze znanymi modelami empirycznymi, jak w przypadku termodynamiki kryształu model Einsteina czy Debye'a. Z obliczeń *ab initio* wyznacza się bądź niektóre wielkości występujące w modelach, dzięki czemu liczba parametrów dopasowania do eksperymentu jest znacząco zredukowana. Metody te stanowią uproszczone narzędzie szybkiej analizy właściwości fizycznych, z ominięciem kosztownych obliczeń dużej skali. W omawianej pracy wykorzystano model Einsteina dynamiki kryształu, w którym dynamika ta reprezentowana jest przez tylko jedną częstość. Zależność tej częstości od objętości (przybliżenie kwaziharmoniczne) zamodelowano funkcją wykładniczą. Zależność energii statycznej od objętości wyznaczono z obliczeń *ab initio*, po czym aproksymowano ją funkcją równania stanu Murnaghana. Dwa parametry występujące w modelu (częstość Einsteina i parametr Grüneisena) wyznaczono z dopasowania do wybranych danych doświadczalnych uzyskując opis termodynamiki kryształu w szerokim zakresie temperatur i ciśnień. Opis ten, mimo że uproszczony, wykazał bardzo dobrą zgodność z eksperymentem.

Praca miała charakter monoautorski (wkład **100%**).

6) Scharoch, P., Neugebauer, J., Scheffler, M.

Al(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30: On-top versus substitutional adsorption for Rb and K
(2003) Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, 68 (3), art. no. 035403, pp. 354031-354035.

Projekt realizowany był w ramach 3-miesięcznego stażu w Instytucie Fritz-Haber w Berlinie. W drodze obliczeń *ab initio* pokazano, że w uporządkowanych strukturach *Al(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30* rubidu i potasu na powierzchni *Al(111)* obserwowane doświadczalnie w temperaturze ok. 250K (*Rb*), 220K (*K*) przejście strukturalne polegające na „wypchnięciu” atomu Al znajdującego się pod atomem adsorbentu i utworzeniu waku, ma charakter przejścia nieodwracalnego, czyli że monowarstwy *Rb* (*K*) tworzone na powierzchni *Al(111)* w niskich temperaturach znajdują się w stanie metastabilnym.

Projekt był kontynuacją prac teoretycznych prowadzonych w FHI dotyczących badania właściwości uporządkowanych monowarstw metali alkalicznych na powierzchni *Al*. Byłem głównym wykonawcą obliczeń *ab initio*, zredagowałem także tekst artykułu. Mój wkład szacuję na **40%**.

7) Scharoch, P., Parliński, K., Kiejna, A.

Ab initio calculations of phonon dispersion relations in aluminium
(2000) Acta Physica Polonica A, 97 (2), pp. 349-354.

W pracy wykonano obliczenia związków dyspersyjnych fononów w kryształach *fcc Al*, metodą bezpośrednią, z wykorzystaniem programu PHONON autorstwa Prof. Krzysztofa Parlińskiego. Byłem głównym wykonawcą obliczeń, swój wkład szacuję na **40%**.

8) Kiejna, A., Peisert, J., Scharoch, P.

Quantum-size effect in thin Al(110) slabs
(1999) Surface Science, 432 (1), pp. 54-60.

Nieskończoną powierzchnię kryształu w obliczeniach *ab initio* modeluje się poprzez układ nieskończonych równoległych „desek” (*slab geometry*) „wyciętych” z kryształu litego i rozdzielonych odpowiednio grubymi warstwami próżni, tak aby nie było oddziaływań pomiędzy sąsiadującymi slabami. Pojedynczy *slab* zawiera dwie powierzchnie, której

właściwości chcemy badać. Niestety w przypadku układów metalicznych występuje kwantowy efekt rozmiarowy (QSE – *quantum size effect*), który manifestuje się m.in. przestrzenną oscylacją gęstości ładunku w kierunku normalnym do slabu. Jest to efekt fizyczny, jednak niepożądany w tych obliczeniach, ponieważ prowadzi do zafałszowania charakterystyk właściwości badanej powierzchni. W pracy zbadano wpływ QSE na różne charakterystyki powierzchni *Al(110)* (relaksacja geometrii, praca wyjścia, energia powierzchniowa), poprzez zbadanie ich zbieżności ze względu na od liczbę monowarstw w slabie. Stwierdzono, że QSE ma istotny wpływ na wyniki obliczeń nawet do 15-16 monowarstw.

W projekcie brałem udział w wykonywaniu obliczeń, dyskusji wyników oraz redagowaniu artykułu. Szacuję mój wkład na **30%**.

9) Beattie, Alan R., Abram, R.A., Scharoch, P.

Hole impact ionization rates in InP and In_{0.53}Ga_{0.47}As

(1992) *Semiconductor Science and Technology*, 7 (3 B), pp. B512-B516.

W pracy wykorzystano opracowane przez mnie, w ramach stażu postdoktorskiego (punkt 11 i 12 poniżej), programy do wyznaczania całek przekrycia koniecznych do obliczania elementów macierzowych przejść typu Augera. Mój wkład szacuję na **20%**.

10) Beattie, A.R., Abram, R.A., Scharoch, P.

*Realistic evaluation of impact ionisation and Auger recombination rates for the *ccch* transition in InSb and InGaAsP*

(1990) *Semiconductor Science and Technology*, 5 (7), art. no. 018, pp. 738-744.

W pracy wykorzystano opracowane przez mnie, w ramach stażu postdoktorskiego (punkt 11 i 12 poniżej), programy do wyznaczania całek przekrycia i energii progowych koniecznych do obliczania prawdopodobieństw przejść typu Auger. Mój wkład szacuję na **20%**.

11) Beattie, A.R., Scharoch, P., Abram, R.A.

Impact ionisation threshold energy surfaces for anisotropic band structures in semiconductors

(1989) *Semiconductor Science and Technology*, 4 (9), art. no. 003, pp. 715-723.

Praca wykonana w ramach stażu postdoktorskiego na Uniwersytecie Durham w Wielkiej Brytanii. Korzystając z metod opisanych poniżej (punkt 12) wyznaczono powierzchnie progowych energii (w strefie Brillouina) dla przejścia typu Auger *ccch* oraz *chlh* w *InSb*, *InAs*, *InP*, *GaAs* i *GaSb*. Mój wkład szacuję na **30%**.

12) Scharoch, P., Abram, R.A.

A method of determining the overlap integrals used in calculations of Auger transition rates in semiconductors

(1988) *Semiconductor Science and Technology*, 3 (10), art. no. 002, pp. 973-978.

Praca wykonana w ramach stażu postdoktorskiego na Uniwersytecie Durham w Wielkiej Brytanii. Celem było opracowanie efektywnej metody obliczania całek przekrycia koniecznych do wyznaczania elementów macierzowych przejść typu Auger w półprzewodnikach. Metoda była oparta na przybliżeniu *k_p* z uwzględnieniem oddziaływania odległych pasm w procedurze Löwdina. Uzyskano bardzo dobrą zgodność z całkami przekrycia obliczanymi znacznie kosztowniejszą obliczeniowo metodą nielokalnego

pseudopotencjału Chelikowskiego-Cohena. Mój wkład polegał na opracowaniu modeli, ich implementacji, testowaniu, a także na współredagowaniu artykułu. Mój wkład szacuję na **60%**.

13) Scharoch, P., Pawlikowski, J.M.

Quantum efficiency of internal photoeffects in narrow-gap semiconductors. II. Calculation results in comparison with experimental data

(1984) Journal of Applied Physics, 55 (6), pp. 1487-1491.

W pracy zastosowano model i programy opisane w punkcie 14 (poniżej) do obliczeń wydajności kwantowej wewnętrznego fotoefektu w półprzewodnikach z wąską przerwą energetyczną (*InSb* i *Cd_xHg_{1-x}Te*). Uzyskano interesującą zależność wyników od gęstości elektronowej, poprzez występującą w modelu stałą ekranowania. Artykuł zawiera także wyniki przeprowadzonego przez mnie eksperymentu i ich porównanie z obliczeniami. Mój wkład szacuję na **60%**.

14) Scharoch, P., Szatkowski, J., Pawlikowski, J.M.

Quantum efficiency of internal photo-effects in narrow-gap semiconductor: A model

(1982) Journal of Applied Physics, 53 (8), pp. 5710-5714.

Artykuł zawiera opis modelu oraz jego implementacji do obliczeń wydajności kwantowej wewnętrznego fotoefektu, gdzie dla energii wzbudzeń większych od $2E_g$ (E_g – przerwa energetyczna) istotną rolę odgrywają przejścia typu Auger prowadząc do zwiększenia wartości wydajności kwantowej powyżej 1. Praca realizowana była w ramach projektu doktorskiego po kierunku Prof. J.M.Pawlikowskiego. Mój wkład szacuję **na 50%**.

15) Kaluski, M., Macher, M., Scharoch, P., Stasiński, L,

EM field estimation in the vicinity of multiple panel antenna systems for FM and TV broadcasting

(1996) Electromagnetic Compatibility 1996 - Thirteenth International Wrocław Symposium Pages: 79-84

Artykuł jest jednym z rezultatów mojej wieloletniej współpracy z Instytutem Łączności (później CBR TPSA i Orange Labs), podczas której zajmowałem się modelowaniem pól elektromagnetycznych w otoczeniu anten nadawczych i różnych konstrukcji rozpraszających pola EM. Mój wkład szacuję **na 20%**

Promotorstwo pozostałych prac dyplomowych

- 1) Krzysztof Tatarczyk, *From ab initio dynamics to thermodynamics of chosen polyatomic systems*, (2000)
- 2) Tomasz Dobrzycki, *Związki dyspersyjne fononów dla ścianki (110) aluminium*, (2002)
- 3) Jarosław Pytowski, *Dynamika i termodynamika niskowymiarowych, periodycznych struktur atomowych – obliczenia 'ab initio'*, (2004)

- 4) Łukasz Głowacki, *Dielektryczne i dynamiczne właściwości ALAs – obliczenia 'ab initio'*, (2008)
- 5) Maciej Winiarski, *Badania 'ab initio' podstawowych własności kryształów ferromagnetycznych Fe, Co i Ni w warunkach równowagi statycznej*, (2009)
- 6) Wojciech Golubiński, *Wyznaczanie podstawowych własności metalicznego wodoru – obliczenia 'ab initio'*, (2010)
- 7) Grzegorz Kinal, *Budowa interfejsu użytkownika programu do analizy pól elektromagnetycznych anten nadawczych UHF i VHF*. (2008) (projekt inżynierski)
- 8) Bartłomiej Dochniak, *Konstrukcja i testowanie modeli numerycznych przestrzennych charakterystyk promieniowania elementów antenowych UHF i VHF*. (2009) (projekt inżynierski)

Referaty wygłoszone na międzynarodowych konferencjach w ramach tematyki nieobjętej rozprawą habilitacyjną

1. Scharoch P, Peisert J, Neugebauer J; *Understanding the temperature dependent surface multilayer relaxation of Al(110); an ab initio approach*; 2nd Workshop on ab-initio phonon calculation, Kraków 2007;
2. Scharoch P; *Thermal properties from first principles with the use of the Free Energy Surface concept*. 27th Max Born Symposium, Multiscale Modeling of Real Materials, Wrocław 2010;

Paweł Scharoch

Paweł Scharoch