

Kraków, dnia 18 maja 2016 r.

dr hab. Przemysław Piekarczyk
Zakład Komputerowych Badań Materiałów
Instytut Fizyki Jądrowej
im. Henryka Niewodniczańskiego
Polskiej Akademii Nauk
ul. Radzikowskiego 152
31-342 Kraków

Ocena osiągnięć naukowych oraz istotnej aktywności naukowej doktora Pawła Scharocha

Dr Paweł Scharoch jest adiunktem w Katedrze Fizyki Teoretycznej na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej. W roku 1986, Paweł Scharoch obronił pracę doktorską z fizyki zatytułowaną „*Wydajność kwantowa wewnętrznego efektu fotoelektrycznego w półprzewodnikach z wąską przerwą energetyczną*” na Politechnice Wrocławskiej. Po doktoracie przebywał na stażu postdoktorskim w zespole Teorii Fizyki Półprzewodników na Uniwersytecie Durham, Wielka Brytania (1987-1988). W latach 1985-1991 oraz 1995-2000 (1/3 etatu) pracował w Instytucie Łączności, oddział we Wrocławiu, w latach 2001-2002 odbył staż naukowy w Instytucie Fritza-Habera w Berlinie, a od 2008 do 2015 był zatrudniony w Centrum Badawczo-Rozwojowym Telekomunikacji Polskie S.A. jako Główny Specjalista w Zakładzie Badawczym (1/2 etatu). Od października 1991 pracuje na Politechnice Wrocławskiej.

Ocena osiągnięć naukowo-badawczych na podstawie przedstawionego cyklu wybranych publikacji

Przedstawiona do recenzji rozprawa habilitacyjna zatytułowana „*Studia obliczeniowe 'ab initio' właściwości strukturalnych, elastycznych i elektronowych wybranych układów półprzewodnikowych*” obejmuje cykl 9 prac (oznaczonych numerami od **H1** do **H9**) opublikowanych w latach 2013-2015 w czasopiśmie *Journal of Alloys and Compounds* (2 prace), *Computer Physics Communications*, *Computational Materials Science*, *Journal of Physics D: Applied Physics*, *Journal of Applied Physics*, *Applied Physics Letters* (2 prace), *Semiconductor Science and Technology*. Czasopisma te mają zasięg ogólnoswiatowy i dosyć wysoki impact factor. Prace te

mają od dwóch do jedenastu autorów, w dwóch pracach dr Paweł Scharoch jest pierwszym autorem (**H2** i **H3**). Oświadczenia współautorów prac określają ich wkład do tych publikacji. W pięciu pracach czysto obliczeniowych Habilitant ocenia swój udział na 25% (2 prace), 30%, 50% i 60%. W pozostałych pracach Habilitant ocenił swój udział w części teoretycznej na 40% (3 prace) i 60%.

Główna tematyka badawcza przedstawionego cyklu prac dotyczy własności elektronowych i strukturalnych mieszanych stopów półprzewodnikowych z grupy III-V wyznaczanymi metodami obliczeniowymi z pierwszych zasad. W pracy **H1** zbadano wpływ składu atomowego w stopie $\text{AlN}_{1-x}\text{P}_x$ na stałą sieci i przerwę energetyczną stosując dwa podejścia: metodę superkomórki (SC) i metodę mieszania alchemicznego (AM), wykorzystując w obliczeniach zmodyfikowany funkcjonal energii korelacji-wymiany MBJLDA (Modified Becke Jonson Local Density Approximation). Metoda AM daje łukowatą zależność stałej sieci od wartości domieszkowania x i duże odstępstwo od prawo Vegarda (spełnione z dobrym przybliżeniem w metodzie SC). Również w przypadku przerwy energetycznej obie metody dają inne zależności od x . Metoda SC pokazuje na silną zależność przerwy energetycznej od konfiguracji atomowej i relaksacji położeń atomowych. Praca **H2** dotyczy ważnego problemu zaniżania przerwy energetycznej półprzewodników w ramach standardowych przybliżeń stosowanych w teorii funkcjonału gęstości (DFT): LDA i GGA. Zastosowano metodę korekcji przerwy energetycznej wyliczając różnicę energii stanu wzbudzonego i podstawowego w zależności od parametru dopasowania - szerokości połówkowej funkcji Gaussa, która definiuje ułamkowe obsadzenie stanów elektronowych. Metodę zastosowano do wyznaczenia przerwy energetycznej w półprzewodniku $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Ten sam układ badany był w pracy **H3**, gdzie wyliczono zależność stałej sieci, parametrów elastycznych i ich pochodnych oraz przerwy energetycznej od poziomu domieszkowania x dla struktur blendy cynkowej i wurcytu. Głównym celem było przetestowanie metody AM przez porównanie z wynikami uzyskanymi metodą SC dla wybranych wartości x . Metoda ta daje akceptowalne wartości stałych elastycznych, natomiast prowadzi do нефizycznej zależności stałej sieci i przerwy energetycznej od x . Pokazano, że główną przyczyną rozbieżności jest brak relaksacji położeń atomowych w przybliżeniu AM. W kolejnej pracy (**H4**) przebadano własności elektronowe hipotetycznego stopu $\text{Tl}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$. W obliczeniach zastosowano potencjał korelacyjno-wymienny MBJLDA i uwzględniono oddziaływanie spin-orbita. Pokazano, że ze wzrostem koncentracji atomów Tl do wartości $x=0.25$ przerwa energetyczna maleje liniowo, a rozszczepienie spin-orbita w tym zakresie gwałtownie rośnie. Stwierdzono również odwrócenie kolejności stanów $\text{N}(2p)$, co jest zachowaniem typowym dla izolatorów topologicznych.

Prace **H5** - **H9** powstały we współpracy z dr hab. Robertem Kudrawcem i jego grupą z Laboratorium Optycznej Spektroskopii Nanostruktur Politechniki Wrocławskiej. Oprócz pracy **H9**,

badania te dotyczą struktury elektronowej półprzewodników III-V domieszkowanych bizmutem. W trzech z tych prac oprócz obliczeń DFT zaprezentowano nowe wyniki eksperymentalne z pomiarów optycznych. Głównym celem pracy **H5** było zbadanie zmian w strukturze pasmowej związku $\text{GaSb}_{1-x}\text{Bi}_x$ w funkcji domieszkowania bizmutu (eksp. $x < 5\%$). Zaproponowano nową metodę obliczeniową będącą połączeniem dwóch podejść AM i SC: rachunki przeprowadzono w superkomórce 16-atomowej i jeden z atomów Sb został zastąpiony atomem alchemicznym Sb/Bi w proporcji odpowiadającej koncentracji x w zakresie 0-12.5%. Wyniki obliczeń ilościowo bardzo dobrze zgadzają się z eksperymentalną zależnością przerwy energetycznej, która maleje z rosnącą koncentracją x . Obliczenia pokazały, że domieszkowanie Bi zarówno obniża dno pasma przewodnictwa, jak i podwyższa wierzchołek pasma walencyjnego. Podobną metodę zbadano przejścia elektronowe w studni kwantowej $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x/\text{GaAs}$ (**H6**). Wyznaczono położenie przerwy energetycznej w układzie z domieszkowanym Bi względem przerwy czystego GaAs (offsety pasm) i otrzymano dobrą zgodność mierzonej wielkości z obliczonymi w ramach podejścia SC-AM. W pracy **H7** zbadano eksperymentalnie i teoretycznie wpływ domieszkowania Bi na przerwę energetyczną i rozszczepienie spin-orbita w półprzewodniku $\text{InP}_{1-x}\text{Bi}_x$. Otrzymano dobrą zgodność zmiany położenia wierzchołka pasma walencyjnego i dna pasma przewodnictwa otrzymanych w obliczeniach DFT i pomiarach metodą bezkontaktowego elektroodbicia (CER). Kolejna praca **H8** zawiera analizę zależności przerwy energetycznej i rozszczepienia spin-orbita od domieszkowania Bi w sześciu różnych półprzewodnikach III-V oraz porównanie z danymi eksperymentalnymi z literatury. Ostatnia praca cyklu przedstawia badania struktury pasmowej półprzewodnika $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ w funkcji domieszkowania Sn (do ok. 10%) z zastosowaniem pomiarów metodą CER i obliczeń DFT. Efekty wpływu deformacji kryształu opisano przy pomocy teorii Bira-Pikusa. Wyznaczono energie przejść optycznych z pasm dziur lekkich, ciężkich i spin-orbita, otrzymując dobrą zgodność wyników obliczeń z doświadczeniem. Pokazano również nieliniową zależność przerwy wzbronionej i rozszczepienia spin-orbita od domieszkowania.

Za najważniejsze osiągnięcia naukowo-badawcze przedstawione w rozprawie habilitacyjnej uważam:

- 1) zaproponowanie metody SC-AM, która łączy podejście obliczeń w superkomórce z metodą atomu alchemicznego,
- 2) opracowanie metody cechowania energii, która umożliwia porównywanie struktur pasmowych w różnych materiałach,
- 3) zastosowanie powyższych metod do zbadania wpływu domieszkowania na wartość przerwy energetycznej i rozszczepienia spin-orbita w szerokiej grupie półprzewodników III-V,
- 4) pokazanie jaki jest mechanizm zmniejszania się przerwy poprzez szczegółową analizę

- zmian zachodzących w paśmie walencyjnym i przewodnictwa badanych materiałów,
- 5) zbadanie trendów chemicznych struktury elektronowej domieszkowanych półprzewodników grupy III-V, w szczególności modyfikacji podstawowych parametrów istotnych z punktu widzenia zastosowań w optoelektronice: przerwa wzbroniona, offsety pasm, czy rozszczepienie spin-orbita,
 - 6) zbadanie jakości dwóch przybliżeń często stosowanych w obliczeniach struktury pasmowej stopów: przybliżenia kryształu wirtualnego (VCA) oraz modelu BAC (band anticrossing).

Osiągnięcia naukowo-badawcze zawarte w rozprawie habilitacyjnej dra Pawła Scharocha oceniam bardzo wysoko. Wyniki przedstawionych badań w znacznym stopniu poszerzają wiedzę na temat własności elektronowych półprzewodników z grupy III-V, w szczególności wpływu domieszkowania na strukturę pasmową tych związków. Ważnym osiągnięciem habilitanta jest rozwinięcie metod obliczeniowych, które umożliwiają badanie wpływu domieszek o małej koncentracji na strukturę elektronową. Podjęta przez habilitanta tematyka badawcza jest bardzo ciekawa z punktu widzenia badań podstawowych, jednocześnie dotyczy własności elektronowych istotnych z punktu widzenia zastosowania tych materiałów w urządzeniach optoelektrycznych. Z cyklu prac habilitacyjnych najczęściej cytowana jest praca **H5** (9 cytowań), pozostałe mają mniej cytowań. Należy jednak podkreślić, że cały cykl prac został opublikowany stosunkowo niedawno i w bardzo krótkim okresie czasu (w latach 2013-2015). Pokazuje to, że tematyka badań przedstawiona w rozprawie jest bardzo aktualna i rozwija się dynamicznie.

Ocena dorobku naukowego i aktywności naukowo-dydaktycznej habilitanta

Całkowita liczba publikacji dra P. Scharocha w bazie Journal Citation Reports (JRC) w momencie przygotowania rozprawy habilitacyjnej wynosiła 24 (dwie kolejne prace ukazały się w 2015 roku). Suma wskaźnika Impact Factor dla tych publikacji wynosi 44,083 (Journal Citation Reports). Aktualna liczba cytowań publikacji (bez autocytowań) według bazy Web of Science wynosi: 107. Indeks Hirscha według bazy Web of Science: 6.

W ostatnich latach tematyka badań prowadzonych przez dra Pawła Scharocha dotyczyła głównie własności materiałowych otrzymywanych metodami obliczeniowymi z pierwszych zasad. W pracach nie włączonych do rozprawy habilitacyjnej badane były m.in. własności magnetyczne metali (Fe, Co, Ni), własności fononowe i termodynamiczne aluminium. Kolejna praca zajmująca się własnościami powierzchni Al(111) z adsorbowanymi atomami alkalicznymi (opublikowana w Phys. Rev. B) powstała we współpracy z Matthiasem Schefflerem w trakcie stażu naukowego w Instytucie Fritza-Habera w Berlinie. Dwie prace dotyczące termicznych własności powierzchni

Al(110) (opublikowana w Phys. Rev. B) i semiempirycznych metod badania własności termodynamicznych kryształów (Acta Phys. Pol. A) są monoautorskie. Dr Paweł Scharoch zajmował się również przejściami typu Auger i wewnętrznym efektem fotoelektrycznym w półprzewodnikach, jak również tak odmienną tematyką jak badanie pola elektromagnetycznego wokół systemów antenowych. Oceniam dorobek naukowy dra Pawła Scharocha jako bardzo dobry, chociaż ilość cytowań wszystkich prac nie jest wysoka (pomimo publikacji prac w dobrych czasopismach naukowych).

Dr P. Scharoch był wykonawcą w dwóch krajowych projektach badawczych. Przebywał na dwóch dłuższych stażach naukowych w bardzo dobrych grupach badawczych w Durham i Berlinie. Brał aktywny udział w kilkunastu konferencjach krajowych i zagranicznych, wygłosił 6 referatów, w tym jeden zaproszony. Posiada jeden patent krajowy o tytule "Sposób zasilania układu antenowego i system zasilania układu antenowego". Posiada duże doświadczenie w działalności dydaktycznej. Prowadził kursy semestralne m.in. z Fizyki ogólnej, Fizyki komputerowej i Elementów fizyki współczesnej. Opracował skrypt i prowadził zajęcia z Metod obliczeniowych fizyki. Prowadził wykłady w ramach Dolnośląskiego Festiwalu Nauki i innych akcji popularyzacji nauki. Przedstawił szereg prezentacji konferencyjnych związanych z działalnością dydaktyczną. W latach 2000-2014, był promotorem dziewięciu prac magisterskich i pięciu projektów inżynierskich. Oceniam bardzo wysoko działalność dydaktyczną dra P. Scharocha, zarówno związaną z pracą dydaktyczną na Politechnice Wrocławskiej, jak i działalnością popularno-naukową. Dowodem tej aktywności jest z pewnością Złota Odznaka Politechniki Wrocławskiej, przyznana w roku 2008 przez Rektora Politechniki Wrocławskiej.

Podsumowując stwierdzam, że zarówno osiągnięcia naukowe przedstawione w rozprawie habilitacyjnej, jak również pozostałe prace z dorobku dra Pawła Scharocha reprezentują wysoki poziom badawczy i wnoszą istotny wkład do badań w dziedzinie fizyki ciała stałego. Wysoko oceniam również aktywność naukową habilitanta, która obejmuje aktywny udział w konferencjach i bardzo szeroką działalność dydaktyczną. Osiągnięcia naukowo-badawcze spełniają warunki określone w ustawie o stopniach i tytule naukowym dla osób ubiegających się o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego (z dnia 14 marca 2003 r. z późniejszymi zmianami). Wnioskuje o przyjęcie rozprawy habilitacyjnej i o dopuszczenie dra Pawła Scharocha do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

dr hab. Przemysław Piekarczyk

