

Prof., dr hab. Ryszard Buczko  
Instytut Fizyki PAN  
Warszawa

Warszawa, 16 czerwca 2016 r.

**Ocena osiągnięcia naukowego dr. Pawła Scharocha w związku z przeprowadzonym postępowaniem habilitacyjnym.**

Dr Paweł Scharoch od wielu lat związany jest z Politechniką Wrocławską. Na uczelni tej uzyskał dyplom magistra inżyniera oraz w roku 1986 obronił pracę doktorską zatytułowaną „Wydajność kwantowa wewnętrznego efektu fotoelektrycznego w półprzewodnikach z wąską przerwą energetyczną”. Od roku 1991 jest tam zatrudniony na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki. Obecnie jako adiunkt w Katedrze Fizyki Teoretycznej. Przez kilka lat pracował także w Centrum Badawczo-Rozwojowym Telekomunikacji Polskiej S.A. oraz w Instytucie Łączności. Odbył dwa zagraniczne staże naukowe. Jeden w Berlinie w Departamencie Teorii Instytut Fritz-Haber, drugi po doktoracie w zespole Teorii Fizyki Półprzewodników Uniwersytetu Durham w Wielkiej Brytanii. Można więc przyjąć, że jest doświadczonym naukowcem, a z racji zatrudnienia na Politechnice ma duże doświadczenie dydaktyczne. Jego naukowy dorobek nie jest jednak imponujący jak na tyle lat pracy. Jest współautorem 29 publikacji cytowanych 112 razy. Jego aktualny indeks Hirscha wynosi 6 (dane z Web of Science, czerwiec 2016). Parametry bibliograficzne są jednak w zupełności wystarczające aby ubiegać się o tytuł doktora habilitowanego.

Dr Paweł Scharoch jako swoje osiągnięcie naukowe zgłosił zbiór 9 prac. Zatyłował swoje osiągnięcie „Studia obliczeniowe ‘ab initio’ właściwości strukturalnych, elastycznych i elektronowych wybranych układów półprzewodnikowych”. Wybrane układy to mieszane układy półprzewodnikowe, ważne z punktu widzenia zastosowań w przyrządach optoelektronicznych jak i w nanotechnologii. Prace mają charakter teoretyczny oraz teoretyczno-doświadczalny. Jak wynika z oświadczeń współautorów we wszystkich tych pracach dr Paweł Scharoch pełnił główną rolę w planowaniu badań teoretycznych, przeprowadzaniu obliczeń oraz interpretacji ich wyników. Prace dotyczą badania własności strukturalnych jak i elektronowych takich związków mieszanych jak:  $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$  stopy In-V-Bi, Ga-V-Bi,  $\text{Tl}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ ,  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  oraz  $\text{AlN}_{1-x}\text{P}_x$ . W

pracach teoretycznych jak i w teoretycznych częściach prac doświadczalnych autorzy używają standardowych metod z pierwszych zasad opartych na teorii funkcjonału gęstości (DFT). W celu wyliczenia zależności od składu wybranych własności układów mieszanych używają dużych (choć moim zdaniem często zbyt małych) superkomórek oraz przybliżenia alchemicznego. W celu zniwelowania znanego problemu zaniżania przerw energetycznych uzyskiwanych przy pomocy metod DFT często używają funkcjonał energii korelacji-wymiany MBJLDA (*Modified Becke Jonson Local Density Approximation*). Problem zbyt małej przerwy wzbronionej związany jest z wypukłością funkcjonałów korelacji i wymiany stosowanych w przybliżeniu LDA (*Local Density Approximation*) i GGA (*Generalized Gradient Approximation*). Dr Scharoch razem z dr. Winiarskim zaproponowali swój ciekawy i efektywny sposób korygowania wartości przerwy energetycznej. Autorzy zaproponowali metodę polegającą na odpowiednim uśrednieniu energii przejść Kohna Shama wokół przerwy prostej. Pokazali również, że jest ona równoważna ścisłej metodzie polegającej na obliczeniu różnicy samouzgodnionych energii dla stanu wzbudzonego i podstawowego układu i następnie interpolowania układu do nieskończonych rozmiarów. Praca na ten temat, opublikowana w 2013 roku i wchodząca w skład osiągnięcia naukowego, nie spotkała się jednak z szerokim odzewem w środowisku. Jest cytowana jedynie 3 razy (2 bez autocytowań). Jednym z powodów jest być może fakt, że proponowana metoda korekcji numerycznej wartości przerwy nie daje jednak możliwości przewidywania jednoczesnej zmiany kształtu pasm w pobliżu przerwy.

W zbiorze przedstawionych prac autorzy interesują się głównie wyliczaniem takich własności badanych stopów jak: własności elastyczne, zależność od składu stałej sieci oraz struktury pasmowej (głównie przerwy energetycznej i rozszczepienia spin-orbita). Wyniki, jeśli to możliwe porównywane są z wynikami doświadczeń. Autorzy zaproponowali również metodę cechowania energii ab initio pozwalającą na wyznaczenie zależnych od składu bezwzględnych przesunięć wierzchołków pasm. Pozwoliło to na otrzymanie wielkości offsetów zgodnych z doświadczeniem dla stopu  $\text{GaSb}_{1-x}\text{Bi}_x$  oraz dla innych związków In-V-Bi. W ostatniej z przedstawionych publikacji autorzy badają ciekawe z punktu widzenia zastosowań w optoelektronice kryształy  $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ . Domieszkowanie germanu atomami cyny pozwala na zwiększenie ruchliwości nośników oraz zmianę charakteru przerwy wzbronionej ze skośnej na prostą. Praca ma charakter doświadczalnie teoretyczny. Metodą bezkontaktowego elektro-odbicia mierzono energie przejść optycznych z pasm dziur lekkich, ciężkich i spin-orbita. Pozwoliło to w szczególności na

zbadanie wpływu wbudowanego naprężenia na energie pasm. Przeprowadzone obliczenia teoretyczne własności  $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$  pomogły w interpretacji wyników.

Przedstawione przez habilitanta prace pomagają w przewidywaniu trendów chemicznych własności badanych stopów. Są metodologicznie spójne i mają istotne znaczenie przy projektowaniu hetero i nanostruktur przy użyciu badanych układów mieszanych dla różnych zastosowań, zwłaszcza w optoelektronice. Uważam, że dr Scharoch wykazał się podjęciem ważnego tematu i opanowaniem adekwatnych technik teoretycznych pozwalających na jego realizację.

Habilitant był wykonawcą dwóch krajowych grantów. Niestety nie był kierownikiem żadnego z nich co może budzić wątpliwości w sprawie jego umiejętności starania się o finansowanie przyszłych badań.

Z racji zatrudnienia na Politechnice Wrocławskiej dr Scharoch ma bogaty dorobek dydaktyczny. Przygotował i prowadził wiele kursów i wykładów. Opiekował się także wieloma studentami. Był promotorem kilkunastu prac inżynierskich i magisterskich. Swoje prace przedstawiał na wielu konferencjach. Wygłosił na nich sześć referatów. Brał też czynny udział w Dolnośląskich Festiwalach nauki dając wykłady na wiele tematów, często niezwiązanych bezpośrednio z prowadzonymi przez niego badaniami.

Podsumowując przedstawione przez dr Scharocha osiągnięcia, uważam że spełnia on kryteria oceny kandydata wymienione w rozporządzeniu ministra nauki i szkolnictwa wyższego warunkujące nadanie stopnia doktora habilitowanego. Wnioskuje więc o dopuszczenie go do dalszych etapów postępowania.



Ryszard Buczko