

Dr hab. Andrzej Łusakowski
Instytut Fizyki PAN
Al. Lotników 32/46
02-558 Warszawa

Warszawa, 20 sierpnia 2019

DZIEKANAT WYDZIAŁU FIZYKI
WPŁYNEŁO

2019 -08- 27 JB.ute

**Ocena osiągnięcia naukowego dr Nevilla Gonzaleza Szwackiego
„Badanie wpływu domieszek metali przejściowych na własności klasycznych
półprzewodników metodą obliczeń z pierwszych zasad”
oraz jego dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego dla potrzeb postępowania o
nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego**

Przebieg kariery naukowej i zawodowej Habilitanta

Pan Nevill Gonzalez Szwacki obronił pracę magisterską w 1998 roku na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Praca magisterska została wykonana pod kierunkiem prof. dr hab. Jana Blinowskiego a jej tytuł to „Trójwymiarowy model oddziaływania pomiędzy warstwami magnetycznymi w supersieci EuTe/PbTe”. Następnym stopniem był stopień doktora nauk fizycznych uzyskany w Instytucie Fizyki PAN w Warszawie w 2003 roku. Promotorem rozprawy doktorskiej zatytułowanej „Własności elektronowe, strukturalne i optyczne stopów $GaAs_{1-x}N_x$ i $Ga_{1-x}B_xAs$ ” był prof. dr hab. Piotr Bogusławski.

W latach 2003 – 2006 Habilitant był zatrudniony w Instytucie Fizyki PAN w Warszawie na stanowisku adiunkta. W latach 2004 - 2009 przebywał w Stanach Zjednoczonych jako Robert A. Welch Postdoctoral Fellow w trzech placówkach: Texas Southern University, Texas Tech University i Rice University. Od 2010 roku do chwili obecnej jest adiunktem naukowym w Instytucie Fizyki Teoretycznej Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego.

Ocena osiągnięcia naukowego kandydata do stopnia doktora habilitowanego

Przedstawione osiągnięcie naukowe składa się z ośmiu, ściśle powiązanych ze sobą tematycznie prac (H1 - H8) opublikowanych w czasopismach o międzynarodowym zasięgu: Physica B (H1), Physical Review B (H2, H3, H4, H6, H7), Scientific Reports (H5) i Solid State Communications (H8).

Tematem wiodącym powyższych prac jest teoretyczny opis wpływu domieszek metali przejściowych na różne własności fizyczne klasycznych półprzewodników. Dr Nevill Gonzalez Szwacki jest jedynym autorem pracy H8, natomiast pozostałe prace powstały we współpracy z wieloma autorami, którzy przedstawili oświadczenia dotyczące ich wkładu w powstałe publikacje. Z oświadczeń tych wynika jednoznacznie, że jeżeli chodzi o część teoretyczną tych prac, dr Nevill Gonzalez Szwacki był bez wątpienia wiodącą osobą prowadzącą obliczenia i interpretację wyników. Przedstawione prace powstały w latach 2007 – 2017, a więc co najmniej 4 lata po otrzymaniu stopnia doktora i mogą stanowić osiągnięcie naukowe będące podstawą do wnioskowania o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

Prace H1 i H2 dotyczą zjawiska niezmiernie ważnego z punktu widzenia produkcji krzemowych komórek fotowoltaicznych. Istnienie głębokich poziomów energetycznych donorowych i akceptorowych spowodowanych nieuniknioną obecnością jonów metali przejściowych, na przykład żelaza, prowadzi do znacznego ograniczenia wydajności tych układów. Z badań doświadczalnych wiadomo, że wprowadzanie wodoru do krzemu zawierającego jony żelaza zmniejsza liczbę aktywnych głębokich poziomów, jednak mikroskopowy mechanizm zjawiska nie jest znany. Teoretycznej analizie pasywacji aktywnych poziomów energetycznych przy pomocy wodoru

poświęcone są właśnie prace H1 i H2. W pracach tych autorzy rozważają bardzo dużą liczbę możliwych konfiguracji kompleksów jonów żelaza i wodoru, obliczają ich energie wiązania, położenia poziomów energetycznych, ich stany spinowe i ładunkowe. Określają jakie konfiguracje są odpowiedzialne za obserwowane doświadczalnie wyniki elektronowego rezonansu paramagnetycznego (EPR) a jakie są obserwowane przy pomocy technik spektroskopii poziomów energetycznych defektów (DLTS). Analizowane są również kompleksy żelazo – wodór – bor. Z metodologicznego punktu widzenia warto podkreślić jest jednocześnie stosowanie, przynajmniej w pracy H2, dwóch różnych pakietów obliczeniowych, SIESTA, gdzie bazą funkcji falowych są pseudoorbitale atomowe, i VASP z bazą funkcji falowych w postaci fal płaskich.

Tak jak rozumiem, konkluzja tych prac jest w pewnym sensie negatywna, pomimo zbadania olbrzymiej liczby różnych wzajemnych rozkładów żelaza i wodoru, obliczenia teoretyczne nie wskazują na pasywację głębokich stanów energetycznych przy pomocy wodoru. Mimo to, uważam, że prace te stanowią istotny wkład w zrozumienie zjawisk zachodzących przy wprowadzaniu wodoru do krzemu zawierającego jony żelaza.

Z punktu widzenia spintroniki niezwykle ważnym problemem jest problem agregacji jonów magnetycznych w półprzewodnikach. Chodzi o to, aby jony magnetyczne były rozłożone równomiernie, wówczas o własnościach magnetycznych takich układów decydują oddziaływania pomiędzy jonami magnetycznymi a nośnikami swobodnymi. Agregacja jonów prowadzi bowiem do bezpośrednich silnych sprzężeń pomiędzy nimi i tracimy wówczas w dużym stopniu kontrolę nad własnościami magnetycznymi półprzewodnika. Z drugiej jednak strony, agregacja może doprowadzić również do separacji faz, to znaczy powstania nowych nanokryształów w matrycy, co może być interesujące z punktu widzenia badań podstawowych, a przy założeniu posiadania kontroli nad tym procesem, prowadzić do ewentualnych zastosowań.

Praca H3 jest pracą teoretyczną, której celem jest zbadanie problemu agregacji jonów żelaza, chromu i manganu w azotku galu. Zostały zbadane również własności magnetyczne różnych klasterów. Według mnie są dwa zasadnicze wyniki tej pracy. Po pierwsze, obliczenia wskazują na agregację wewnątrz kryształu dla wszystkich trzech wymienionych jonów. To znaczy, że z energetycznego punktu widzenia korzystne są takie rozkłady, w których jony są najbliższymi sąsiadami. Po drugie, na powierzchni jedynie jony żelaza wykazują tendencję do grupowania się, natomiast jony manganu i chromu się odpychają. Tłumaczy to dlaczego jony manganu i chromu są bardziej równomiernie rozłożone, natomiast dodanie niewielkiej, rzędu 1%, ilości żelaza już prowadzi do powstania nowych faz obserwowanych po wyhodowaniu kryształu. Wyniki teoretyczne zostały w pracy H3 porównane z dostępnymi wynikami eksperymentalnymi.

Praca H4 jest jedną z prac, przy powstawaniu której dr Gonzalez Szewacki ściśle współpracował z licznymi grupami prowadzącymi eksperymenty. Zasadniczym celem tej pracy było zbadanie wpływu obecności akceptorowej domieszki magnezu w azotku galu na przestrzenny rozkład jonów żelaza. Badano przy tym dwa rodzaje domieszkowania – kiedy jony magnezu są rozłożone równomiernie w objętości kryształu i kiedy są one skoncentrowane w bardzo ograniczonych obszarach (w literaturze jest to określane jako delta doping). Olbrzymi materiał doświadczalny (SIMS, dyfrakcja promieni X, pomiary wysokiej rozdzielczości elektronowej mikroskopii transmisyjnej, pomiary magnetyczne SQUID, EPR) dostarczył dużą ilość informacji na temat rozkładu jonów żelaza w objętości półprzewodnika.

W ramach analizy teoretycznej domieszkowanie magnezem zostało również porównane do domieszkowania krzemem. Zakładając tak jak w poprzednich pracach sensowne konfiguracje jonów żelaza i magnezu w objętości i na powierzchni kryształu, Habilitant przeprowadził odpowiednie obliczenia, których rezultaty zostały przedstawione na rysunku 13. Rezultaty te stanowią główny wynik teoretyczny i zostały wykorzystane w rozdziale VB pracy do wytłumaczenia niektórych eksperymentów. Analiza zawarta w rozdziale VB byłaby bardziej zrozumiała, gdyby uzupełnić ją o rozważania kinetyczne dotyczące wzrostu kryształu.

W świetle otrzymanych wyników niezrozumiałe jest natomiast zdanie ze streszczenia pracy

mówiące o zwiększonej agregacji jonów żelaza na powierzchni rosnącego kryształu przy obecności magnezu. Z rysunku 13 wynika bowiem, że energia tworzenia pary Fe-Fe na powierzchni jest ujemna, natomiast przy obecności magnezu dodatnia co oznacza, że w obecności Mg pary Fe-Fe będą się tworzyć rzadziej. To samo stwierdzenie zostało powtórzone w rozdziale VI (strona 10, prawa kolumna, ostatni paragraf), a także w autoreferacie (strona 15 wersji polskiej, punkt (i)).

Praca H5 to kolejny przykład ścisłej współpracy Habilitanta z grupami eksperymentalnymi. Praca poświęcona jest kompleksom manganu i magnezu w azotku galu. Ponieważ magnez w GaN jest płytkim akceptorem, początkowo spodziewano się, że jego wprowadzenie zwiększy liczbę dziur potrzebnych do ferromagnetycznego oddziaływania pomiędzy jonami manganu, zgodnie z modelem Zenera. Okazało się jednak, że dziury wprowadzane przez magnez są wychwytywane przez jony manganu zmieniając ich stan ładunkowy, a także tworzą się kompleksy Mn – Mg_n, gdzie liczba jonów magnezu (ligandów) w kompleksie, n, zawiera się pomiędzy 1 a 4. Średnia liczba ligandów zależy od warunków wzrostu kryształu, a przede wszystkim od stosunku zawartości magnezu do zawartości manganu w kryształach, x_{Mg}/x_{Mn} . Analizując różne możliwe rozkłady przestrzenne zostały obliczone energie takich kompleksów, ich stany spinowe i ładunkowe. Przeprowadzona została także analiza statystyczna, to znaczy zależność średniej liczby ligandów w kompleksie od x_{Mg}/x_{Mn} . Obliczenia przeprowadzone przez Habilitanta całkowicie potwierdziły wyniki otrzymane przy pomocy techniki EXAFS. Analiza teoretyczna pomogła zrozumieć wyniki innych doświadczeń, na przykład zanik anizotropii magnetycznej próbek przy obecności jonów magnezu.

Zasadniczym problemem, którym zajmował się Habilitant w pracy H6 jest ważny z punktu widzenia zastosowań wpływ ciśnienia na własności, przede wszystkim magnetyczne, arsenku galu z manganem. Podstawowym celem pracy było określenie wpływu ciśnienia na temperaturę przejścia do stanu ferromagnetycznego. W pracy tej, oprócz metod ab initio zastosowanych do obliczeń struktury elektronowej kryształu mieszanego, a także dla energii oddziaływania jonów magnetycznych, przy analizie temperatury przejścia do stanu ferromagnetycznego T_c zastosowano metody teorii pola średniego i metody Monte Carlo. Otrzymane wartości zmian temperatury krytycznej wraz z ciśnieniem, dT_c/dp , dobrze zgadzają się z danymi doświadczalnymi.

Nie jest zrozumiałym dla mnie początek paragrafu na stronie 3, lewa kolumna, w którym omówione są wyniki gęstości stanów przedstawione na rysunku 1. W przeciwieństwie do tego co piszą autorzy pracy, z rysunku 1 wynika, że poziom Fermiego leży wewnątrz stanów pasmowych i układ powinien mieć charakter metaliczny. Być może jest to spowodowane skalą rysunku i dlatego nie wszystkie szczegóły są widoczne.

Praca H7 jest poświęcona wprowadzaniu jonów magnetycznych do układu trójskładnikowego, $Al_xGa_{1-x}N$. Jest to praca eksperymentalno – teoretyczna. Otrzymane próbki (warstwy epitaksjalne) w całym zakresie składów badane były przy pomocy wielu technik pomiarowych. Zadaniem analizy teoretycznej było sprawdzenie, czy układ trójskładnikowy ma tendencję do separacji faz, to znaczy czy pojawiają się obszary bogate w azotek glinu lub azotek galu. Obliczenia teoretyczne jednoznacznie wskazują, że rozkład jonów galu i glinu jest przypadkowy a kryształ jest jednorodny. Ten wniosek powstał w oparciu o obliczenia energii całkowitej superkomórki dla różnych przestrzennych rozkładów galu i glinu. Okazuje się, że różnice energii dla różnych konfiguracji są bardzo małe, rzędu 50 meV. Natomiast, jeżeli chodzi o wprowadzany do takiego układu mangan, to energetycznie jest daleko korzystniejsze zastępowanie przez ten jon jonów galu niż jonów glinu. Obliczenia wskazują również, że położenia międzywęzłowe są bardzo niekorzystne z energetycznego punktu widzenia.

Ostatnia, praca H8 jest pewną kontynuacją pracy H5, tym razem jest to praca czysto teoretyczna. W pracy zbadano jaki wpływ na własności kryształu azotku galu z manganem ma wprowadzenie domieszek krzemu, czyli donorów, zamiast jak w pracy H5 domieszek magnezu. Ponownie zbadano

szereg konfiguracji kompleksów manganowo – krzemowych, zarówno na powierzchni kryształu jak i w jego objętości. Zostały obliczone ich energie tworzenia, stabilność a także stany ładunkowe o momenty magnetyczne jonów manganu w takich kompleksach.

Podsumowując, cykl ośmiu przedstawionych prac stanowi krok w kierunku głębszego zrozumienia zagadnień fizyki domieszek magnetycznych w półprzewodnikach, Wyniki tych prac są również ważne dla fizyki wzrostu kryształów. Liczba cytowań omawianych publikacji obecnie wynosi 86. To co należy moim zdaniem podkreślić to bardzo ścisły związek rozważań teoretycznych prowadzonych przez Dr Gonzaleza Szwackiego z eksperymentem. Albo jest to bezpośrednia współpraca z grupami doświadczalnymi w trakcie powstawania prac albo analiza istniejących, znanych z literatury danych doświadczalnych. Próby opisu wyników eksperymentalnych, zaproponowanie odpowiedniego modelu to zwykle bardzo trudne zagadnienia. W dużej części prace nie są łatwe do czytania. Jest to spowodowane dużą ilością informacji, na przykład pochodzącej z rozpatrywania dużej liczby możliwych konfiguracji atomowych, co oczywiście należy zaliczyć na plus analizy teoretycznej. Przedstawione powyżej pewne uwagi krytyczne nie zmniejszają w sposób istotny wartości prac.

Ocena innych osiągnięć naukowo-badawczych

Według bazy Web of Science, na dzień 07.08.2019 r. dr Gonzalez Szwacki jest autorem lub współautorem 42 prac naukowych, które zostały opublikowane w czasopismach znajdujących się na liście Journal Citation Reports. Według tej bazy prace te były cytowane 781 razy, w tym 761 razy bez autocytowań, a indeks Hirscha wynosił 13. W przeważającej części publikacji dr Gonzalez Szwacki jest pierwszym autorem.

Tematyka pracy naukowej Habilitanta nie ogranicza się do zagadnień związanych z analizą wpływu domieszek metali przejściowych na własności trójwymiarowych półprzewodników. Zajmował się on również strukturami zero-, jedno- i dwu-wymiarowymi. Wiele prac jest poświęconych jest borowi, lub klasterom albo strukturom dwu-wymiarowym boru i węgla.

Dr Gonzalez Szwacki brał udział w wielu konferencjach międzynarodowych, gdzie oprócz przedstawienia plakatów wygłosił wiele krótkich wystąpień jak również 4 referaty zaproszone.

Ocena dorobku dydaktycznego i popularyzatorskiego oraz współpracy międzynarodowej

Dr Gonzalez Szwacki jest współautorem podręcznika do krystalografii „Basic elements of crystallography”. Prowadził również wykład „Physical Properties of Solids” na Uniwersytecie Rice a także ćwiczenia do pięciu wykładów na Uniwersytecie Warszawskim, Uniwersytecie Kardynała Stefana Wyszyńskiego i w Szkole Nauk Ścisłych.

Jeżeli chodzi o popularyzację fizyki, to Habilitant współorganizował lub uczestniczył przy pokazach w trakcie dwóch Pikników Naukowych i dwóch Festiwali Nauki.

Ponadto, od kilku lat przygotowuje młodzież do międzynarodowej matury z fizyki w ramach International Baccalaureate Diploma Programme.

Habilitant był również promotorem pomocniczym jednej pracy doktorskiej i promotorem jednej pracy licencjackiej na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego.

Obecnie jest kierownikiem jednego projektu badawczego, a także kierował jednym, zakończonym już projektem. Był również wykonawcą w trzech projektach.

Dr Gonzalez Szwacki recenzował około 30 prac w czasopismach naukowych, a także dwa projekty badawcze (NCN OPUS 2012 i Research Council of Katholieke Universiteit Leuven 2011)

Na podstawie powyższych informacji wysoko oceniam dorobek dydaktyczny i popularyzatorski oraz możliwości organizacyjne dr Gonzaleza Szwackiego. Ponadto, listy autorów dużej części prac Habilitanta wskazują na intensywną współpracę międzynarodową.

Rekomendacja

Biorąc pod uwagę moją pozytywną opinię zarówno o przedstawionym osiągnięciu naukowym, dorobku jak również aktywności naukowej dr Nevilla Gonzaleza Szwackiego uważam, że spełnia on wymogi konieczne do uzyskania statusu samodzielnego pracownika naukowego. Dlatego wnioskuję o dopuszczenie dr Nevilla Gonzaleza Szwackiego do dalszego postępowania kwalifikacyjnego celem nadania mu stopnia naukowego doktora habilitowanego.



Dr hab. Andrzej Łusakowski