

Stanisław Krukowski  
Instytut Wysokich Ciśnień  
Polska Akademia Nauk  
01-142 Warszawa  
ul. Sokołowska 29/37

Recenzja  
pracy doktorskiej magistra Piotra Traczykowskiego  
pod tytułem  
„Wykorzystanie statyki molekularnej do modelowania procesów deformacji kryształów  
półprzewodnikowych”

Praca doktorska mgr Piotra Traczykowskiego pod tytułem „Wykorzystanie statyki molekularnej do modelowania procesów deformacji kryształów półprzewodnikowych” wykonana pod kierunkiem dr hab. inż. Pawła Dłużewskiego w Instytucie Podstawowych Problemów Techniki PAN jest poświęcona zagadnieniom modelowania numerycznego własności elastycznych i plastycznych kryształów i materiałów półprzewodnikowych. Celem pracy było zbudowanie narzędzia numerycznego do analizy odkształceń dużej skali w kryształach półprzewodnikowych, a ponadto zastosowanie go do modelowego przypadku struktur opartych na kropkach kwantowych.

Należy ocenić, że wykonana praca zakończyła się sukcesem, tzn. skonstruowaniem odpowiedniego zestawu narzędzi matematycznych i numerycznych w postaci skończonego zestawu programów i procedur numerycznych, umożliwiających obliczanie własności kryształów w półprzewodników nietypowej sytuacji charakteryzującej się występowaniem odkształceń dużej skali. Narzędzie to może być szczególnie użyteczne w przypadku badań szczególnie zaawansowanych układów półprzewodnikowych należących do szybko rozwijającej się dziedziny technologii kwantowych niskowymiarowych nanostruktur półprzewodnikowych, takich jak kropki, druty i studnie kwantowe. Fakt że jest to narzędzie uniwersalne pozwala na jego zastosowanie w badaniach szeregu układów półprzewodnikowych o różnych własnościach fizycznych.

Technicznie praca jest zastosowaniem układu równań typowego dla dynamiki molekularnej i przekształceniem ich do zestawu zmiennych typowego dla metody elementu skończonego. Rozważane układy dynamiki molekularnej obejmują oddziaływanie dwu- i trzycząstkowe o stosunkowo krótkim zasięgu, co jest warunkiem wystarczającym dla modelowania układów kryształów półprzewodników oraz gazów szlachetnych. Zasięg oddziaływania uniemożliwia zastosowanie tego modelu dla układów jonowych. Dodatkowe możliwości rysują się w dziedzinie kryształów molekularnych. Wykonane przekształcenia umożliwiają zastosowanie uniwersalnego solwera programu FEAP, o wysokiej stabilności i szybkości co stanowi o sile programu. Otrzymane równania pozwalają w przyszłości zastosowanie także innych solwerów po odpowiednich modyfikacji i kompilacji kodu źródłowego.

Rozprawa doktorska mgr Traczykowskiego składa się z 6 rozdziałów obejmujących wstęp, informacje o układach będących przedmiotem rozważań, opisu teoretycznych podstaw metody oraz opis zagadnień nieliniowej teorii sprężystości oraz rozdział zawierający opis

