

Warszawa, 28.IX. 2005

Włodzimierz Sosnowski
Doc. dr hab. inż.
IPPT PAN
Zakład Metod Komputerowych
Pracownia Metod Obliczeniowych Mechaniki Nieliniowej
Ul. Świętokrzyska 21, 00049 WARSZAWA
e-mail: wsosn@ippt.gov.pl

RECENZJA

rozprawy doktorskiej p. mgr. Piotra Traczykowskiego pt. „ Wykorzystanie statyki molekularnej do modelowania procesów deformacji kryształów półprzewodnikowych”

1. Cel i zawartość pracy

Celem rozprawy doktorskiej p. mgr. Piotra Traczykowskiego było zbudowanie narzędzia numerycznego do przeprowadzenia obliczeń komputerowych służących do wyznaczenia konfiguracji równowagowej atomów rzeczywistych kryształów o strukturze zaburzonej defektami. Autor zaadoptował do tego celu algorytm metody elementów skończonych (MES) i włączył do nich równania statyki molekularnej.

Praca zawiera 110 stron, w tym wstęp zawierający rzeczowy przegląd literatury, dwa rozdziały poświęcone omówieniu punktu startowego badań, dwa rozdziały zasadnicze stanowiące opis wyników uzyskanych przez Autora, podsumowanie, spis rysunków, bibliografię oraz dodatek z kodami źródłowymi najważniejszych procedur numerycznych.

We wstępie Autor zwraca uwagę na fakt, że tylko pozornie obliczenia z wykorzystaniem statyki molekularnej mogą być prostsze niż obliczenia uwzględniające dynamikę atomów. W rzeczywistości metody dynamiki molekularnej pozwalają jedynie w sposób jawny całkować równania ruchu atomów i w efekcie nie dają możliwości określenia konfiguracji równowagowej wewnątrz kryształu. Taką konfigurację można zidentyfikować wykorzystując równania statyki molekularnej i solwery MES. Ceną jest konieczność dość pracochłonnego wprowadzenia pierwszych i drugich pochodnych potencjałów oddziaływań międzyatomowych do programu MES oraz odwracania bardzo dużych macierzy zawierających miliony stopni swobody.

Dalsze dwa rozdziały zawierają podstawowe informacje o półprzewodnikach oraz podstawy teoretyczne statyki i dynamiki molekularnej. Biorąc pod uwagę nowatorstwo podjętej tematyki takie obszernie omówienie stanu wiedzy jest uzasadnione a dodatkowo ta część pracy posiada spore walory dydaktyczne.

W rozdziałach 4 i 5 Autor pokazuje, w jaki sposób można wprowadzić potencjały oddziaływań międzyatomowych do równań statyki i prezentuje sposoby modelowania kryształów półprzewodnika zawierających celowo fabrykowane kropki kwantowe. Rozdziały te zawierają również obliczenia przemieszczeń atomów w

