

Prof. dr hab. Krzysztof Parlinski
Instytut Fizyki Jądrowej, PAN, Kraków

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej „OBLICZENIA PÓŁ-EMPIRYCZNE I
Z PIERWSZYCH ZASAD WŁASNOŚCI OPTYCZNYCH JONÓW 3d i 4f
w KRYSZTAŁACH” dra Dr Mikhaila G. Brika**

Rozprawa habilitacyjna dr Mikhaila Brika składa się z dwu podstawowych części. Część pierwsza podsumowuje dane typu parametrów naukowych, a druga składa się z 15-tu oryginalnych publikacji.

Zacznę od danych naukowo-parametrycznych zamieszczonych w Autoreferacie. Kandydat skończył studia fizyki, i obronił doktorat (1995) na Uniwersytecie w Kubaniu. W latach 2001 – 2009 przebywał na stażach na Uczelniach w Erytrei, Izraelu, Japonii, w Instytucie Fizyki Uniwersytetu w Tartu, Estonia, gdzie zatrudniony jest do chwili obecnej.

Jest Autorem około 190 publikacji naukowych, w tym wymienia 26 w bardzo dobrych czasopismach naukowych. Jest autorem ośmiu rozdziałów w książkach naukowych. W/g Web od Science posiada 823 cytaty. Jego indeks Hirsch’a=15. Aż 115 razy prezentował się na konferencjach międzynarodowych, wygłaszając 20 referatów (oral), oraz dwa zaproszone. Wygłosił 14 zaproszonych seminariów i napisał 5 skryptów akademickich. Uczestniczył w 8-miu projektach naukowych. Przeczytane Oświadczenia Współautorów potwierdzają istotny wkład kandydata w artykułach przedstawionych w rozprawie.

Kandydat prowadził również działalność dydaktyczną. Wykładał mechanikę klasyczną i stosowaną, wprowadzenie do teorii kwantowej atomów i cząsteczek, teorii widm atomowych. Przygotował dwa skrypty dla studentów.

W rozprawie habilitacyjnej umieszczono kilka zagadnień, w tym energetyczną analizę struktur pasmowych kryształów zawierających atomy metali przejściowych, własności optyczne i oddziaływania elektronowo-wibronowe, wreszcie obliczenia *ab initio* własności strukturalnych, elektronowych, optycznych i elastycznych dla kryształów czystych i domieszkowanych.

Bardziej szczegółowo omówię zawartość prac powstałych głównie dzięki zastosowaniu nowoczesnych metod rachunków *ab initio* i dostarczających danych tak dokładnych, że możliwe jest otrzymanie zgodności z podobnymi pomiarami. Będą to publikacje [9] – [15] listy publikacji włączonej do rozprawy habilitacyjnej. Wykonane i opublikowane obliczenia bazują na programie CASTEP będącego częścią Material Studio 4.0. Program Castep wymaga zbudowania przybliżonej superkomórki badanego wycinka kryształu z nałożonymi periodycznymi warunkami brzegowymi, i zastosowania teorii DFT do otrzymania rozwiązań w postaci zoptymalizowanej superkomórki, stały sprężystych, elektronowej struktury pasmowej. Nieco większym nakładem pracy można otrzymać informacje o własnościach magnetycznych kryształu, oraz zmianach spowodowanych nałożeniem ciśnienia hydrostatycznego. Oto szczegóły:

W publikacji [9] policzono struktury elektronowe czterech chalkopirytów CuXS_2 ($X=\text{Al}$, Ga , In) oraz AgGaS_2 . Materiały te mają zastosowanie w optyce nieliniowej, bateriach słonecznych i podobnych urządzeniach optoelektronicznych. Aby otrzymać poprawną przerwę energetyczną użyto tak zwanego „scissor” operatora. Jest to parametr pozwalający wyregulować szerokość przerwy. Otrzymane struktury elektronowe udało się rozdzielić na pasma pochodzące od orbitali składowych atomów. Następny wyliczony parametr to funkcje dielektryczne i indeksy odbicia badanych kryształów. Publikacja [14] dotyczy tych samych chalkopirytów, wyliczono jednak stałe elastyczne, moduły sprężystości i objętość właściwą. Dwie ostatnie wielkości były wyznaczone w funkcji wysokich ciśnień.

Praca [10] zajmuje się dwoma materiałami: $\text{Y}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$, oraz $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$. Oba materiały krystalizują w strukturze opisanej grupą przestrzenną $\text{Fd-}3\text{m}$, $Z=8$. Otrzymane w rachunkach stałe sieci dobrze zgadzają się z wartościami zmierzonymi. Struktury pasmowe posiadają przerwę energetyczną i wykorzystane zostały do wyliczenia widma absorpcji oraz rzeczywistej i urojonej części stałej dielektrycznej. Obliczenia pod ciśnieniem uzupełniły wyniki o ciśnieniowe zależności długości wiązań, stałych sieci, objętości właściwej i przerwy energetycznej.

Podobne *ab initio* obliczenia [11] zostały wykonane dla czystych TiO_2 w strukturach anatazu i rutylu, i w tych samych kryształach dotowanych domieszkami Sm^{3+} . Samar zastępuje Ti. Wyliczono stałe sieci, elektronowe struktury pasmowe z podziałem na podpasma, widma adsorpcyjne, rzeczywistą i urojoną składową elektronowej stałej dielektrycznej. Widma

absorpcyjne czystych kryształów zgadzają się z widmami zmierzonymi. Jony Sm^{3+} wprowadzają dodatkowe stany energetyczne usadowione w przerwie energetycznej i prowadzą do dodatkowych pików na krawędzi wyliczonego widma absorpcji.

W następnej publikacji [12] zmierzono widmo absorpcji kryształu $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4$ (YAB) domieszkowanego Cr^{3+} . Materiał ten jest interesujący dla konstrukcji diod emitujących światło (LED), gdyż wykazuje fluorescencję od czerwieni do podczerwonego zakresu. Jednak główna część pracy referuje obliczenia *ab initio* elektronowej struktury pasmowej dla czystego i domieszkowanego kryształu. Pierwszym wynikiem jest struktura pasmowa YAB, na którym widać przerwę energetyczną 5.471 eV, bliską wartości zmierzonej 5.7 eV. Płaski kształt pasm walencyjnych w funkcji wektora falowego wskazuje na wyjątkowo dużą masę efektywną i niską mobilność nośników ładunku. Wprowadzenie jednego atomu Cr^{3+} w miejsce Al^{3+} spowodowało nieznaczną deformację komórki elementarnej z heksagonalnej do trójskośnej. W tej komórce wyliczono dwa obszary stanów lokalnych jonu Cr^{3+} , które lokują się w przerwie energetycznej. Pochodzą one odpowiednio ze stanów E_g i T_{2g} jonu Cr. To widmo pozwoliło wyliczyć widmo absorpcji i porównać je z widmem zmierzonym. Obserwowane niewielkie piki tego widma udaje się skorelować ze stanami elektronowymi jonu Cr^{3+} .

Wykonano również rachunki [13] dla YAlO_3 domieszkowanego ziemią rzadką Ce^{3+} zastępującego Y^{3+} . Kryształ YAlO_3 jest stosowany w scyntylatorach. Charakteryzuje się ogromną przerwą energetyczną 8.8 eV. Taka przerwa daje duże pole dla zastosowań różnych wariantów dotowania. Kryształ YAlO_3 opisany jest grupą przestrzenną Pnma . Obliczona struktura pasmowa pokazała, które poziomy atomy dają wkład do otrzymanych poziomów energetycznych. Rachunki pokazały, że poziomy 4f jonu Ce^{3+} są umieszczone w górnej połowie przerwy energetycznej. Dla tej struktury pasmowej można było wyliczyć widmo absorpcyjne, które zawiera ślady niezerowego natężenia pochodzącego od poziomów jonu Ce^{3+} .

Ostatni artykuł [15] nie rozważa własności półprzewodników, ale metali posiadających duże wartości stałych elastycznych i charakteryzujące się wysoką twardością. Obliczenia prowadzono dla następujących azotków: ScN , TiN , VN , CrN , ZrN , NbN . Wyliczono struktury elektronowe, które potwierdziły metaliczny charakter tych materiałów, oraz możliwość powstania struktury magnetycznej w CrN . Wyliczono stałe elastyczne, oraz mapy

gęstości elektronowych tych kubicznych kryształów. Prosta analiza pozwoliła również wykreślić kierunkową zależność współczynnika Young'a, będącego stosunkiem naprężenia do wywołanego w tym samym kierunku odkształcenia wzdłużnego. Kombinacje trzech współczynników elastycznych C_{11} , C_{12} , C_{44} sugeruje, że ScN, TiN, VN, ZrN posiadają stosunkowo izotropowe własności elastyczne, ale monokryształy NbN, w szczególności CrN, trudno ścisnąć wzdłuż osi krystalicznych $[100]$, $[010]$, $[001]$, a bardzo łatwo w kierunku siecznych, tj. $[110]$, $[111]$ i kierunków ekwiwalentnych. Autorzy odnotowują ten fakt, ale nie sugerują możliwości jakichś jego specjalnych konsekwencji.

Prace ab initio są wykonane bardzo profesjonalnie i dotyczą istotnych problemów fizyki półprzewodników, oraz własności mechanicznych materiałów. Artykuły są napisane zrozumiale i kompetentnie. Niniejszym stwierdzam, że cały materiał przedstawiony mi do recenzji bardzo dobrze spełnia warunki wymagane dla przyznania stopnia naukowego doktora habilitowanego) i wnoszę o dopuszczenie dr Mikhaila Brika do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.



Prof. dr hab. Krzysztof Parlinski

Kraków, 5 października 2012r.