



Wrocław University of Science and Technology

Department of Semiconductor Materials Engineering

Wpłynęło dnia 2.07.2024
Podpis Am Dewek

Wrocław, 28 czerwca 2024r.

Prof. Robert Kudrawiec
Katedra Inżynierii Materiałów Półprzewodnikowych
Wydział Podstawowych Problemów Techniki
Politechnika Wrocławska
ul. Wybrzeże S. Wyspiańskiego 27,
50-370 Wrocław
Tel.: +48 723 645 481, Fax: +48 71 328 36 96
e-mail: robert.kudrawiec@pwr.edu.pl

**Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr Romana Hrytsaka zatytułowanej
„Wpływ defektów punktowych na termiczną stabilność układu wielu studni
kwantowych” wykonanej pod opieką dr hab. Małgorzaty Sznajder prof.
Uniwersytetu Rzeszowskiego oraz dr Pawła Kempistego**

Praca doktorska Pana mgr Romana Hrytsaka jest pracą z fizyki ciała stałego i jej przedmiotem jest dyfuzja/migracja atomów w InGaN oraz na między-powierzchniach studni kwantowych InGaN/GaN. Tego typu studnie kwantowe odegrały kluczową rolę w rewolucji oświetleniowej jaka wydarzyła się w ubiegłej dekadzie i która została doceniona Nagrodą Nobla z fizyki w 2014 roku dla trzech japońskich uczonych: Isamu Akasaki, Hiroshi Amano i Shuji Nakamura.

Mimo tego, że przez ostatnie dekady wiele uwagi i prac poświęcono studniom kwantowym InGaN/GaN w wielu ośrodkach naukowych, a w tym w Instytucie Wysokich Ciśnień Polskiej Akademii Nauk, i technologia wytwarzania tego typu studni kwantowych jest już w dużej mierze opanowana to wciąż istnieją wyzwania technologiczne i naukowe w tym obszarze. Jednym z nich jest uzyskanie jednorodnych studni kwantowych z wysoką zawartością indu. Jest to wyzwanie technologiczne, które jest motywacją niniejszej dysertacji, która ma charakter obliczeniowy i posługuje się obliczeniami z zasad pierwszych. Tego typu obliczenia w ostatnich dwóch dekadach zyskały na coraz większym zainteresowaniu ze względu na wzrost zasobów obliczeniowych oraz rozwój pakietów obliczeniowych. Warto tutaj zauważyć, że na początku rozwoju technologii wytwarzania studni kwantowych InGaN/GaN metody obliczeniowe oraz zasoby obliczeniowe nie były wystarczające do przeprowadzenia tego typu badań. Takie możliwości pojawiły się w ostatnich latach i niniejsza dysertacja wykorzystuje tę możliwość. Podsumowując wybór tematyki uważam, że w chwili obecnej nie jest ona przełomowa ale jest bardzo ważna dlatego, że lepsze zrozumienie procesów dyfuzji/migracji atomów w InGaN i na międzypowierzchniach InGaN/GaN daje możliwość poprawy technologii wytwarzania jednorodnych studni kwantowych o zwiększonej zawartości indu. Tego typu studnie są potrzebne do uzyskania emisji przy dłuższych falach niż kolor



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Wrocław University
of Science and Technology

Department of Semiconductor
Materials Engineering

27 Wybrzeże Wyspiańskiego St
50-370 Wrocław

T: + 48 71 320 35 50
T/F: + 48 71 328 07 77

www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Bank Account:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Wrocław University of Science and Technology

Department of Semiconductor Materials Engineering

niebieski (tj. uzyskanie koloru zielonego i czerwonego) w ramach tej samej technologii, tj. technologii na bazie GaN.

Recenzowana rozprawa składa się z siedmiu rozdziałów i podsumowania, z czego rozdziały 5-7 przedstawiają oryginalne wyniki uzyskane przez doktoranta, a rozdziały 1-4 wprowadzają czytelnika do tematyki dysertacji i obejmują: rozdział 1 – podstawowe informacje o azotku galu i azotku indu; rozdział 2 – opis metod obliczeniowych tj. teorii funkcjonału gęstości; rozdział 3 – klasyfikację i opis defektów, opis prawa Ficka oraz zjawiska Kirkendalla w metalach; rozdział 4 – opisuje metodykę obliczeniową oraz dobór parametrów obliczeniowych. Podsumowując te cztery rozdziały wprowadzające czytelnika w tematykę dysertacji a w tym szczegóły obliczeniowe opisane w rozdziale 4 uważam, że czyta się je bardzo dobrze, w odpowiednich miejscach doktorant odsyła czytelnika do odpowiedniej literatury, a jej dobór jest właściwy i świadczy o bardzo dobrej znajomości literatury przedmiotu. Balans pomiędzy długością opisu oraz zawartością informacji potrzebnych do zrozumienia wyników przedstawionych w głównej części rozprawy jest dobrze wyważony.

Odnosząc się do zawartości rozprawy opisanej w rozdziałach 5-7 uważam, że doktorant uzyskał interesujące wyniki, które stanowią istotny wkład do literatury przedmiotu. Część z tych wyników została opublikowana, a lista publikacji związanych z niniejszą rozprawą przedstawiona jest na końcu dysertacji.

W rozdziale 5 doktorant przedstawił obliczenia wysokości barier energetycznych na migrację atomów azotu, galu oraz indu w GaN. Wykazał, że istnieje energetyczna „hierarchia” barier na migrację poszczególnych defektów i najniższą barierę na migrację ma atom indu migrujący za pośrednictwem wakansu metalu, a najwyższą barierę na migrację ma atom azotu. O ile ten pierwszy wniosek ma znaczenie dla warstw oraz studni kwantowych InGaN/GaN to ten wniosek dotyczący azotu mimo, że formalnie może być poprawny jest dość dziwny w kontekście migracji atomów w InGaN lub przez między-powierzchnię InGaN/GaN. Czy to ma jakieś znaczenie w przypadku warstw InGaN i studni kwantowych InGaN/GaN tj. studni gdzie zawartość azotu jest stała. O komentarz w tej kwestii chciałbym prosić doktoranta podczas obrony. Ponadto w niniejszym rozdziale wykonano obliczenia widm fononowych dla InGaN z defektami punktowymi co umożliwiło wyznaczenie efektywnych barier energetycznych i współczynników dyfuzji wybranych defektów punktowych w funkcji temperatury.

W rozdziale 6 przeanalizowano migrację macierzystych defektów punktowych tj. wakansów metalu (In i Ga) i azotu, przez między-powierzchnię w pseudomorficznych i dopasowanych do uśrednionej stałej sieci w supersieciach InN/GaN. Tutaj również zaobserwowano pewną „hierarchię” przy wyznaczaniu barier energetycznych dla migracji wakansów metalu (In i Ga) i azotu. Następnie przeanalizowano układ InGaN/GaN o dwóch zawartościach indu (12.5 i 25%). Jest to układ, który jest bardziej złożony ze względu na możliwość dodatkowych defektów, tj. kompleksów defektów. W rozdziale tym wykazano, że kompleksy te są



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Evaluated by
IEP INSTITUTIONAL
EVALUATION
PROGRAMME
www.iep-qaa.org

Wrocław University
of Science and Technology

Department of Semiconductor
Materials Engineering

27 Wybrzeże Wyspiańskiego St
50-370 Wrocław

T: + 48 71 320 35 50
T/F: + 48 71 328 07 77

www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Bank Account

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Wrocław University of Science and Technology

Department of Semiconductor Materials Engineering

bardziej mobilne, a studnie kwantowe InGaN z większą zawartością indu są bardziej podatne na migracje atomów i kompleksów w poprzek między-powierzchni. Ten wynik tłumaczy od strony mikroskopowej trudności w wytworzeniu jednorodnych studni kwantowych InGaN/GaN z dużą zawartością indu oraz ich stabilność pod obciążeniem tj. podczas pracy przyrządu półprzewodnikowego. W przypadku tego rozdziału byłem nieco skonfundowany czytając jego podsumowanie (strona 129) czy aby na pewno doktorant zawarł tam to co chciał i nie użył za dużych skrótów i uproszczeń.

W rozdziale 7 pokazano, że atomy indu są bardziej mobilne w InGaN (22%In) niż w GaN. Dodatkowo wykazano, że atomy indu dyfundują szybciej niż atomy galu zarówno w InGaN jak i w GaN. To prowadzi do niezrównoważonych strumieni dyfuzji atomów In i Ga na między-powierzchniach InGaN/GaN i tłumaczy powstawanie pustych przestrzeni w termicznie zdegradowanym układzie wielu studni kwantowych InGaN/GaN. Tego typu obserwacja ma związek z efektem Kirkendalla, który wcześniej został zaobserwowany dla metali.

Podsumowując całość dysertacji nie mam najmniejszych wątpliwości, że doktorant w niniejszej rozprawie jednoznacznie dowiódł, że nie tylko posiada ogólną wiedzę teoretyczną w tej tematyce oraz dyscyplinie nauki fizyczne, która jest wymagana do uzyskania stopnia doktora, ale również potrafi tą wiedzę wykorzystać do współpracy z eksperymentatorami i przy pomocy modelowania z zasad pierwszych dostarczyć bardzo cennych informacji, które tłumaczą eksperyment. Na szczególne docenienie zasługuje publikacja ACS Appl. Mater. Interfaces 2021, 13, 7476–7484 w której doktorant jest współautorem i w której wyniki eksperymentalne wytłumaczone są przy pomocy obliczeń przedstawionych w recenzowanej dysertacji. Jest to publikacja, która jest już kilkanaście razy cytowana. Ponadto bardzo podoba mi się publikacja Hrytsak et al., *Modeling of the Point Defect Migration across the AlN/GaN Interfaces—Ab Initio Study*, Materials 15 (2), 478 (2022), która jest już 8 razy cytowana. To świadczy o tym, że są to badania na odpowiednio wysokim poziomie, którymi interesują się inni uczeni. Chciałbym również podkreślić, że niniejsza dysertacja jest bardzo dobrze zredagowana (znalezione przeze mnie literówki i uwagi co do sformułowań są bardzo nieliczne i podane są na końcu niniejszej recenzji).

Podsumowując, uważam że rozprawa doktorska Pana Romana Hrytsaka spełnia wszystkie wymagania stawiane przez ustawę z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (tekst jednolity: Dz. U. z 2023 r. poz. 742 z późn. zm.) oraz zwyczajowo przyjęte kryteria w środowisku fizyki ciała stałego. W niniejszej rozprawie Pan Hrytsak dowiódł, że posiada ogólną wiedzę z fizyki ciała stałego na wysokim poziomie, jego dzieło jest oryginalne, a on sam jest gotowy do samodzielnego prowadzenia badań. Dlatego wnioskuję o dopuszczenie mgra Romana Hrytsaka do publicznej obrony niniejszej rozprawy oraz wnioskuję o jej wyróżnienie.



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Wrocław University
of Science and Technology

Department of Semiconductor
Materials Engineering

27 Wybrzeże Wyspiańskiego St
50-370 Wrocław

T: + 48 71 320 35 50
T/F: + 48 71 328 07 77

www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Bank Account

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Wrocław University of Science and Technology

Department of Semiconductor Materials Engineering

Uzasadnienie wniosku o wyróżnienie rozprawy:

Za wyróżnieniem tej dysertacji przemawia praktyczny aspekt uzyskanych wyników tj. ich wykorzystanie do zrozumienia wyników eksperymentalnych co zostało potwierdzone bardzo dobrą publikacją w ACS Appl. Mater. Interfaces. W przypadku obliczeń z zasad pierwszych bardzo często zdarza się, że autorzy „rozpędzają się” i liczą układy, których się nie da zrealizować eksperymentalnie. W przypadku obliczeń przedstawionych w niniejszej dysertacji tak nie jest. Doktorant (oraz jego promotorzy) stąpają twardo po ziemi i starają się przy pomocy dostępnych narzędzi teoretycznych wytłumaczyć zjawiska, które są obserwowane eksperymentalnie. Ponadto dysertacja jest bardzo starannie zredagowana, wyniki przedstawione w dysertacji zostały opublikowane w kilku publikacjach, a w tym we wspomnianym czasopiśmie ACS Appl. Mat. Interfaces, które jest bardzo prestiżowe. Środowisko docenia te wyniki o czym świadczy już ponad 20 cytatów.

Robert Kudrawiec

Robert Kudrawiec

Uwagi redakcyjne:

Strona 6: ‘a nawet setki różnych rodzajów defektów punktowych’ – z tym się trudno zgodzić.

Strona 16: powinno być ‘dla $x = 1$ ’

Strona 22: ja bym napisał w czasie przeszłym ‘została opracowana’

Strona 138: powinno być ‘...wyhodować studnie kwantowe...’



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Wrocław University
of Science and Technology

Department of Semiconductor
Materials Engineering

27 Wybrzeże Wyspiańskiego St
50-370 Wrocław

T: + 48 71 320 35 50
T/F: + 48 71 328 07 77

www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Bank Account

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434