

Bírálat Gali Ádám Sűrűségfüggvény-elméleten alapuló elektronszerkezet-számítások a gyakorlatban fontos pontokba szilíciumkarbidban, szilíciumkarbid nanocsövekben és gyémántban című MTA doktori értekezéséről

A szilíciumon alapuló félvezető-technológia nagy sikere lehetőséget ad arra, hogy a félvezetőket szélesebb körben is alkalmassá tegyünk. Ennek a célnak teljesítésére dolgozták ki az, a technológia által használt egyéb félvezető anyagokat, mint a III-V félvezetőket. Nagyon ígéretesnek tűnik a szilíciumkarbid és a gyémánt is, de e két anyag esetében még sok a tisztázatlan, megoldatlan kérdés, hogy a technológiát ki lehessen dolgozni.

Ez a dolgozat éppen ezt a célt kívánja teljesíteni, ezekben az anyagokban a pontokba vizsgálja, amelyek úgy elősegíthetik a jó elektronikai eszközök előállítását, mint gátolhatják a folyamatot.

A problémát elméleti úton közelíti meg. Első elvekből számolja ki az elektronszerkezeteket, és közben vizsgálja azt is, hogy a hibák milyen módosulást hozhat létre az atomelmozdulásokban is.

A dolgozat bevezetőjében bemutatja az anyagokat, amelyekben a pontokba vizsgálja. Ezután kitér az alkalmazott módszerekre. Igyekszik mindent a részletekbe menően bemutatni, például az adiabatikus szétcsatolással részletesen foglalkozik. Aki meg akarja érteni a dolgozatot, annak ez már ismert kell, hogy legyen. Igyekszik minden effektust tárgyalni, és így leírásai többször felületesek. A Hartree-Fock egyenletet ismert variációs módszerrel vezeti le. Ezt a részt feleslegesnek tartom, mivel a levezetés minden haladóbb kvantummechanikai könyvben megtalálható. Ugyanez mondható el a sűrűségfüggvény módszerre is. A kicserélődési-korrelációs tag leírása érdekes és új információkat tartalmaz, éppen ezért hiányolom, hogy nem magyarázza el elég részletesen az általa alkalmazott tagokat, azok előnyével és hátrányával. Az olvasó feje megfájdul a sok rövidítéstől, amelyeket mennyiségük miatt nem lehet olyannak megjegyezni, aki nem pontosan ezzel a témával foglalkozik.

A 3. fejezettől tér rá saját számításaira és saját eredményeire. Ebben a fejezetben a tömbi szilíciumkarbid, a negyedik fejezetben a még elő nem állított, de ígéretes egyrétegű szilíciumkarbid nanocsövek, az ötödik a gyémánt egyes pontokba tárgyalja. Az elvégzett munka egy nagyon aktív, több éven át tartó kutatást tükröz, megmutatja, hogy a jelölt jártas ezen a területen, és olyan hazai és nemzetközi kapcsolatokkal rendelkezik, amely a kutatás élvonalába emeli.

Munkája során különböző programcsomagokat használ, különböző paraméter beállításokkal. Ezeket a lehetőségeket messzemenőig kihasználja, és ezeket virtuóz módon használja.

A dolgozat egy alapos, szépen kivitelezett munka, de számos hiányossága van.

A szövegben néhány helyesírási, nyelvhelyességi hibát találtam:

A második oldalon 2fejezetben egybe van írva.

A 33. oldalon a „figyelembevesszük”, a 112. oldalon a „vegyértéksávtetejének” egybe van írva.

A 24. oldalon szerepelnek a descarti koordináták Ez Descartes-ot jelent?

A 35. oldalon előkerül egy HFR egyenlet. Az mi?

A 37. oldalon a magass-pinű elválasztása furcsa.

Az 51. oldalon azt írja: „Patalogikus esetben”.

A 75. oldalon parallelpipedon szerepel.

83. oldalon, és többször más helyen is minimálni szerepel minimalizálni helyett. A harmonikust hosszú ó-val írja.

A 111. oldalon „kötött” egy t-vel szerepel.

A 116. oldalon „simeretlen eredetű”.

Egyéb, nem nyelvi megjegyzéseim a következők: A második oldalon összehasonlítja a DFT, HF és TBA közelítéseket. Megmutatja, hogy a két fontos közelítés esetében a HF módszer N^4 -nel skálázódik, a DFT csak N^3 -nel. Megkérdezem, hogy miért egyesíti később ezt a két módszert, ha a HF ennyivel lassúbb.

A 16 és 17. oldalon részletes leírást találunk az MCM-ről (Molecular Cluster Model). Ez felesleges, mivel a dolgozatban ezt nem használja.

A 19. oldalon inverzrácsról beszél. Ennek a fogalomnak a megszokott kifejezése reciprok rács.

A 19. oldalon szerepelnek a (2.3), (2.4) és a (2.5) képletek. Nincsenek megmagyarázva a benne szereplő mennyiségek. Például mi a R vektor?

A 25. oldalon bevezeti az atomi egységeket. Megkérdezem, hogy eddig a pontig az értekezés milyen rendszert használt, mert SI-t nem.

A 28. oldalon megállapítja, hogy a HF egyenlet változóiban nem lineáris, és „Az ilyen típusú problémát csak önkonzisztens módon oldhatjuk meg.” Megjegyzem, hogy a nemlineáris problémák megoldásának más módszerei is vannak.

A (2.69) képletben feltételezi, hogy a sűrűség előállítható egyrészcscsűrűségek összegeként. Min alapul ez a feltételezés.

A 46. és 47. oldalon szerepelnek a s_m mennyiségek. Ez a mennyiség dimenziótlan. A (2.99) képletben már van $1/m^2$ dimenziója. Véleményem szerint ez a képlet helytelen.

Megkérdezem, hogy mi a kapcsolat a dolgozatban szereplő pszeudopotenciálok és a Harrison-féle pszeudópotenciálok között?

Miért érdekesek a szeparábilis pszeudopotenciálok, mivel minden kétváltozós függvény felírható

$$\sum_i f_i(\mathbf{r})g_i(\mathbf{r}')$$

alakban (59. oldal).

A 67. oldalon a (2.147) képlet átalakítása hibás. A (2.150) képletet nem lehet megkapni.

A 98. oldalon használja a legstabilabb hiba kifejezést, ez mit jelent?

Többször előfordul, hogy az akceptorszint magasabb energiájú, mint a donorszint (100. oldal). Hogyan lehetséges ez?

A 109. oldalon érdekes szubjektív időmeghatározást használ „Születésemmel egyidőben fedezték fel”.

A konjugens gradiens algoritmus megegyezik a konjugált gradiens algoritmussal?

A 142. oldalon lokalizált állapotokról van szó. Miért nem ad számértéket a lokalizáció fokára (Pl. Bell-Dean-lokalizációfok)?

A 175. oldalon beszél az atom Bohr-magnetonjáról, ami lehet pozitív és negatív. Az 5.3 képletben ugyanez a mennyiség a jól ismert konstans érték. Tisztázza ezt!

A 182. oldalon az NV centrum magyarázata elég zavaros. Remélem, hogy a majd megjelenő New Journal of Physics folyóiratban a cikk érthetőbb lesz. Megemlíti, hogy az NV centrumot fluoreszcens biomarkerként lehet használni. Megkérdem, hogy hogyan miként történik ez?

A 183. oldalon azt írja: a nanogyémánt méretét néhány nanométernyi átmérőre csökkentjük. Ez mit jelent? Mi a nanogyémánt, és mire jó?

A doktori munka eredményeit öt tézispontban foglalja össze. Az öt tézispont 15 alpontot tartalmaz, amelyek lényegében megfelelnek egy-egy ponthibának. Az eredmények újak, színvonaluk megfelel a követelményeknek, ezért minden tézispontot elfogadok.

Megjegyzéseim mellett az elvégzett munkát nagyra értékelem, Eredményei a tudomány és a gyakorlat számára hasznosak. Az értekezés nyilvános vitára bocsátását javaslom, és sikeres védelem esetén javaslom a fokozat odaítélését.

Budapest, 2010. október 14.

Tichy Géza