

A bíráló bizottság értékelése

Gali Ádám sűrűségfunkcionál-elméleten alapuló elektronszerkezet-számításokat végzett a gyakorlatban fontos ponthibákra szilíciumkarbidban, szilíciumkarbid nanocsövekben és gyémántban.

A sűrűségfunkcionál-elmélet alkalmazása során elsőként használt hibrid funkcionálokat szilíciumkarbidok és gyémánt hibahelyeinek tanulmányozására, és ezáltal a korábbiaknál pontosabb eredményeket ért el. Szuperszámítógépekre kidolgozott programcsomagok felhasználásával összeállított egy protokollt, amelyet virtuóz módon használt munkája során.

Fontos eredmény, hogy az egyes hibacentrumok azonosítását a számításai alapján megjósolt rezgési, valamint elektron paramágneses rezonancia (EPR) spektrumok és a kísérleti eredmények elemző összevetésével végezte el. Számításai alapján megjósolta pl., hogy besugárzott szilíciumkarbidban két-szénatomos antisite hiba keletkezik, mely feltevését később elektron paramágneses rezonancia (EPR) kísérletekkel igazolták.

Jelentős eredményt ért el a „félszigetelő” minták kompenzáló hibáinak (antisite-vakancia, divakancia) elméleti értelmezése terén is.

Fontosak az egyfalú szilíciumkarbid nanocsövek H, B és N adalékolásával kapcsolatos számításai, jóslatai.

Érdekesekek és előre mutatóak a gyémántbeli negatívan töltött, ill. semleges nitrogén-vakancia hiba elektronszerkezetére kapott eredményei. Számításokkal támasztotta alá pl., hogy lehetséges a semleges nitrogén-vakancia hiba gerjesztett kvartett elektronspinjét és a környező hiperfinomaktív izotópok magspinjét kvantumbit megvalósítására használni.

Eredményei jelentős nemzetközi visszhangot váltottak ki: összefoglaló cikkek írására és előadások tartására kérték fel.

A jelölt az opponensek és a bizottság részéről feltett számos kérdésre részletes, meggyőző válaszokat adott.

A Bizottság a jelölt minden tézisét elfogadta új tudomány eredményként.

Az eredményhirdetés végén a Bizottság elnöke kiemelte az opponensek színvonalas munkáját!