



Warszawa, 23 października 2018

Recenzja pracy doktorskiej pana mgr Kamila Czeleja

Rozprawa doktorska pana mgr Kamila Czeleja zatytułowana **“Density Functional Theory Investigations of the Electronic Structure and Magneto-Optical Properties of Point Defects and Their Complexes in Diamond”** (w wolnym tłumaczeniu recenzenta na polski: „Struktura elektronowa oraz własności magneto-optyczne defektów punktowych i ich kompleksów w diamencie na podstawie obliczeń w ramach teorii funkcjonału gęstości”) dotyczy niezwykle aktualnego i ważnego, zarówno z punktu widzenia badań podstawowych jak i ewentualnych przyszłych funkcjonalnych zastosowań, problemu struktury elektronowej defektów punktowych w kryształach objętościowych diamentu. Wybraną metodą badawczą są obliczenia w ramach teorii funkcjonału gęstości. Przeprowadzone badania wpisują się w poszukiwania efektywnego sposobu domieszkowania diamentu w celu stworzenia układów dla elektroniki dużej mocy na bazie tego materiału. Wyniki uzyskane w Rozprawie rzucają również światło na możliwości zastosowania badanych układów fizycznych do realizacji idei komputerów kwantowych oraz informatyki kwantowej. Zanim przedstawię szczegółową analizę Rozprawy, chciałbym podkreślić, że jest to bardzo dobra praca doktorska zawierająca nowe i interesujące wyniki oraz wnosząca znaczący wkład do teorii materii skondensowanej oraz fizyko-chemii materiałów.

Rozprawa składa się z czterech rozdziałów, zawierających odpowiednio krótki wstęp, omówienie metodologii teoretycznej, właściwe przedstawienie rezultatów Rozprawy, oraz streszczenie, które uzupełnia obszerna lista publikacji zawierająca 170 pozycji.

Rozprawa jest starannie zredagowana w języku angielskim i zawiera dobrej jakości przejrzyste ilustracje, co powoduje, że czyta się ją z zainteresowaniem i przyjemnością. Z kronikarskiego obowiązku odnotuję pojawienie się zabawnego ‘mangento-optical’ w pierwszym zdaniu na stronie 91. Zwięzły wstęp zawiera najistotniejsze informacje na temat istniejących prac teoretycznych i doświadczalnych poświęconych problemowi domieszkowania kryształów diamentu stanowiąc świetne tło do sformułowanych na końcu wstępu celów rozprawy i uzasadnienia zastosowania odpowiedniej metodologii teoretycznej. W rozdziale poświęconym zastosowanym metodom teoretycznym zawarto najważniejsze założenia stosowanych metod. To może ułatwić lekturę czytelnikom nie będącym specjalistami w dziedzinie teorii funkcjonału gęstości i teorii defektów a zainteresowanych przewidywaniami teoretycznymi przedstawionymi w rozdziale trzecim. Główną część rozprawy stanowi właśnie rozdział trzeci, w którym opisano przewidywania teoretyczne dotyczące bogatej klasy defektów w diamencie. Rozdział rozpoczyna podrozdział przedstawiający techniczne szczegóły przeprowadzonych obliczeń, które zostały wykonane posługując się komercyjnym pakietem obliczeniowym VASP. W opinii recenzenta, wybrane przez Doktoranta opcje zostały wybrane w sposób adekwatny do badanych układów i gwarantują wysoką dokładność obliczeń. W dalszych sekcjach rozdziału trzeciego opisano wyniki obliczeń dla różnych centrów domieszkowych badanych pod kątem znalezienia centrum o najpłytszych możliwych stanach donorowych. Wyniki zostały przedstawione i krytycznie przedyskutowane w sposób szczegółowy uwzględniając w ich dyskusji aktualny stan wiedzy. W dyskusji centrów domieszkowych w diamencie opisano różne stany ładunkowe, strukturę multipletową defektów, jak również stałe sprzężenia nadsubtelnego. Cały rozdział trzeci stanowi bardzo głębokie studium centrów defektowych w diamencie i będzie stanowił przystawową ‘kopalnię wiedzy’ na temat fizycznych efektów domieszkowania diamentu. W opinii recenzenta bardzo interesujące wyniki zawarte są w podrozdziale dotyczącym centrów defektowych zawierających atomy metali przejściowych (Ti) w sąsiedztwie luki i atomów azotu. Te badania powinny przyczynić się również do lepszego zrozumienia kohezji w nowej klasie materiałów dwu-wymiarowych MXenes.

W podsumowaniu, w Rozprawie wskazano na możliwość istnienia w diamencie defektów, które mogą mieć duże znaczenie technologiczne i doprowadzić do interesujących

zastosowań diamentu w elektronice i informatyce kwantowej. Stanowi to zdaniem recenzenta największe osiągnięcie Rozprawy.

Ogólnie, oceniam Rozprawę jako bardzo dobrą a nawet wyróżniającą się. W opinii recenzenta, przedstawiona Rozprawa stanowi duże osiągnięcie badawcze Doktoranta. Doktorant wykazał się umiejętnością sprawnego posługiwania się różnymi metodami teoretycznymi, umiejętnością krytycznej oceny otrzymanych wyników, dobrą znajomością badanego zagadnienia, i jest w stanie wskazać nowe perspektywy badań. Rozprawa zawiera nowe wartościowe wyniki, pogłębia znacząco znajomość mechanizmów domieszkowania diamentu, przybliżając realizację przyrządów elektronicznych wysokiej mocy, układów optoelektronicznych, oraz możliwość praktycznej realizacji algorytmów informatyki kwantowej. Zdaniem recenzenta przedstawiona Rozprawa całkowicie spełnia wymagania ustawy i jednoznacznie kwalifikuje Doktoranta do otrzymania stopnia doktora. W związku z tym **wnoszę o dopuszczenie pani mgr Kamila Czeleja do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

Niestety nie jest mi znany dorobek publikacyjny pana Kamila Czeleja, niemniej sama jakość wyników przedstawionych w rozprawie, ich kompleksowość, dogłębność analizy, ich znaczenie dla przyszłych aplikacji, pozwala mi na stwierdzenie, że Rozprawa stanowi niezwykle istotny wkład w fizykę defektów w diamentcie, a zastosowana metodyka badań może być wzorcem dla studiów nad defektami w innych materiałach. Biorąc również pod uwagę znaczenie przeprowadzonych badań dla możliwości praktycznego wdrożenia nowatorskich idei informatyki kwantowej **wnoszę o wyróżnienie niniejszej Rozprawy.**

Z poważaniem



Prof. dr hab. Jacek A. Majewski