

Recenzja

dorobku naukowego oraz jednotematycznego cyklu publikacji w postępowaniu
habilitacyjnym

Dr Grzegorza MACIEJEWSKIEGO

Tytuł cyklu: NUMERYCZNA ANALIZA DEFORMACJI STRUKTUR
KRYSTALICZNYCH I ICH DEFECTÓW NA POZIOMIE NANOSKALI

Podstawa opinii: Art. 16 Ustawy z dn. 14 marca 2003 r. wraz z Rozporz. Min. Nauki i Szkol.
Wyższ. z dn. 22 września 2011 r.

1. Kandydat

Studia w specjalności Teoria Konstrukcji na Wyższej Szkole Inżynierskiej w Opolu ukończył w r. 1993. W roku 1995 rozpoczął pracę w IPPT-PAN w Warszawie. Rozprawę doktorską nt. Zastosowania metody elementów skończonych do wyznaczania rozkładów naprężeń residualnych w heterostrukturach” obronił w r. 2003. Promotorem pracy był Dr hab. inż. Paweł Dłużewski. Od r. 2003 zatrudniony jest na stanowisku adiunkta w macierzystym instytucie. Przewód habilitacyjny wszczęty na wniosek Kandydata przez CK i skierowany do dalszego postępowania do Rady Naukowej IPPT-PAN.

2. Działalność naukowa Kandydata

Od początku swej pracy w IPPT Kandydat zetknął się z nowoczesnym i obiecującym kierunkiem badań dotyczących zastosowania mechaniki w modelowaniu i analizie procesów zaawansowanych technologii wytwarzania materiałów. Do takich technologii należy epitaksja, mająca zastosowanie w produkcji półprzewodników. Analiza takich procesów i struktur wymagała dobrego przygotowania z mechaniki, nauki o materiałach, metod numerycznych, niezbędnej orientacji w technikach i metodologii pomiaru oraz komputerowej analizy obrazów mikroskopowych. Wymogom tym Kandydat sprostał w pełni, publikując pierwsze prace współautorskie z zakresu analizy dyslokacji i naprężeń resztkowych w heterostrukturach epitaksjalnych. Uwieńczeniem działalności naukowej tego okresu była praca doktorska Kandydata poświęcona zastosowaniu MES w układach tego rodzaju. Tematyka modelowania i analizy numerycznej nanostruktur krystalicznych była obszarem badań Kandydata i po doktoracie. Cechą Jego publikacji i projektów badawczych jest silne sprzężenie nieliniowej mechaniki kontinuum (duże deformacje, duże obroty, nieliniowe związki konstytutywne) z mechanizmami procesów fizyko-chemicznych zachodzących w nanoskali. Do takich zagadnień należą procesy nukleacji dyslokacji, niedopasowania sieci kryształów, wzrostu warstw epitaksjalnych, powstanie pola elektrycznego w otoczeniu rdzenia dyslokacji, powstanie studni kwantowych w epiwarstwach itp. wymienione zagadnienia były przedmiotem prac Kandydata. Z natury tych zagadnień wynika potrzeba

współpracy specjalistów różnych dyscyplin. Prawie wszystkie publikacje Kandydata są współautorskie, ale z uwagi na specyfikę uprawianej tematyki jest to w pełni uzasadnione. Wkład własny Kandydata w rezultaty prac jest istotny i dotyczy wnikliwej i efektywnej nieliniowej analizy numerycznej, bez której rozwiązanie postawionych zadań nie byłoby możliwe. Dorobek Kandydata obejmuje w sumie:

- 20 publikacji (w tym 4 przed doktoratem) opublikowanych w renomowanych czasopiśmie naukowych
- 10 referatów na krajowych i międzynarodowych konferencjach naukowych
- 10 projektów badawczych (w tym 2 jako kierownik grantu)

Brak informacji na temat działalności dydaktycznej oraz przynależności i działalności w towarzystwach i organizacjach naukowych.

Zważywszy na fakt, iż spośród 16 prac opublikowanych po doktoracie 6 pozycji składa się na wydzielony monotematyczny cykl elaboratu habilitacyjnego – to stwierdzić muszę, iż dorobek Kandydata jak na pracownika instytutu naukowego nie jest liczbowo imponujący. Jednakże wartość tego dorobku oceniam przede wszystkim z punktu widzenia jego rangi poznawczej, poziomu naukowego, znaczenia i wkładu do rozwoju mechaniki materiałów. Pod tym względem osiągnięcia naukowo-badawcze Kandydata oceniam za satysfakcjonujące. Uprawiana przez Kandydata tematyka jest poznawczo aktualna i inspirująca, aplikacyjnie nowoczesna i obiecująca zaś z punktu widzenia metodologicznego interdyscyplinarnie efektywna.

Kandydat stosuje nowoczesny aparat mechaniki kontinuum do opisu zjawisk w nanoskali, co obok modelowania atomistycznego (kwantowego, ab initio bądź molekularnego), mieszanego molekularno-kontynualnego oraz wielkoskalowego jest jednym z wiodących kierunków badawczych współczesnej mechaniki oraz inżynierii materiałowej. Prace Kandydata prezentujące nieliniowe komputerowe metody analizy stanów deformacji i naprężeń nanostruktur krystalicznych są znakomitym przykładem efektywności metod kontynualnych w opisie procesów w nanoskali. Wkład Kandydata do rozwoju kontynualnej teorii defektów w heterostrukturach krystalicznych jest bezsporny. W szczególności Kandydat uzyskał oryginalne rezultaty dotyczące:

- opisu dyslokacji w nanoskali
- wyznaczenia stanu deformacji i naprężeń wywołanych dystorsją sieci w warstwach epitaksjalnych
- wydzielania pierwiastka indu w studniach kwantowych heterostruktury warstwowej
- wyznaczenia energii granic fazowych w materiałach SMA
- wyznaczenia odkształceń w diodach laserowych (DL).

3. Rozprawa habilitacyjna (monotematyczny cykl publikacji)

Przedmiotem oceny jest monotematyczny cykl prac [H1-H6] wymienionych w Autoreferacie pkt. 1.3 str. 6, poświęconych modelowaniu nanostruktur o budowie krystalicznej – objętych wspólną nazwą „**Numeryczna analiza deformacji struktur krystalicznych i ich defektów na poziomie nanoskali**”. Ogniwem łączącym wymienione prace jest kontynualny opis mechanizmów deformacji w heterostrukturach o rozmiarach nanoskopowych – wywołanych obecnością dyslokacji bądź niedopasowaniem sieci kryształów. Przedmiotem prac jest zatem modelowanie oraz nieliniowa analiza numeryczna stanu deformacji i naprężeń niejednorodnych układów z defektami o rozmiarach i efektach zachodzących w nanoskali. Cykl prac [H1-H4] dotyczy nanostruktur krystalicznych z defektami w postaci dyslokacji bądź efektów niedopasowania sieci ([H3]), zaś prace [H5-H6] poświęcone są wykorzystaniu metod mechaniki kontinuum do interpretacji wyników

eksperymentów dotyczących wybranych procesów epitaksji w nanoskali. Szczegółowy opis poszczególnych pozycji cyklu jest następujący:

W pracy [H1] rozważa się wpływ dyslokacji o założonym rozkładzie na stan naprężeń reszkowych oraz orientację sieci kryształów. Założono duże deformacje sprężysto-plastyczne (z multiplikatywną dekompozycją gradientu deformacji), duże obroty sieci krystalicznej, płynięcie plastyczne oraz anizotropię materiału. Praca omawia ogólny nieliniowy model dyslokacji w ośrodku sprężysto-plastycznym. Przeprowadzono szczegółową analizę numeryczną dla przykładu dwuwymiarowego. Nieliniowe macierzowe równanie MES rozwiązano metodą Newtona-Raphsona. Podano mapy naprężeń Cauchy'ego oraz rozkład kąta obrotu sieci kryształu soli dla założonej postaci i gęstości dyslokacji.

Pozycja [H2] dotyczy wyznaczenia pola elektrycznego w kryształach wywołanego obecnością dyslokacji. Badaniu poddano kryształ azotku galu (GaN). Na podstawie szczegółowej analizy obrazu wysokiej rozdzielczości, otrzymanego z mikroskopu elektronowego TEM pomierzono dystorsje rdzenia dyslokacji, a stąd, wykorzystując równania piezoelektryczności, obliczono akumulację prądu i rozkład pola elektrycznego wokół dyslokacji. Podano mapy pola oraz rozkład potencjału elektrycznego w epitaksjalnej warstwie GaN.

Praca [H3] jest próbą wyznaczenia parametrów sieci cienkich warstw epitaksjalnych na podstawie pomierzonej krzywizny warstw wywołanej niedopasowaniem sieci kryształów. Istotnym elementem modelowania mechanizmów analizowanego procesu niedopasowania, a stąd wygięcia heterostruktury jest założenie dużych odkształceń, dużych obrotów oraz uwzględnienie gradientu deformacji odpowiedzialnego za dodatkowy depozyt materiału (zwiększona ilość masy).

Publikacja [H4] (jedyna pozycja bez współautorstwa) jest krótką prezentacją kontynuacyjnego modelu deformacji plastycznej spowodowanej dyslokacjami (uogólnienie modelu Krönera na przypadek dużych odkształceń i zadanego tensora gęstości dyslokacji wyznaczonego z analizy obrazu TEM). Podano przykład liczbowy dla monokryształu krzemu (Si), otrzymując rozmiary obszaru rdzenia dyslokacji. Obliczono wartość energii rdzenia i porównano ją z wartościami znanymi w literaturze a otrzymanymi metodami ab initio oraz algorytmem dynamiki molekularnej.

Pozycja [H5] o wyraźnie interdyscyplinarnym charakterze i współautorstwie jest przykładem wykorzystania formalizmu i metod mechaniki do opisu i analizy zjawisk fizykochemicznych zachodzących w nanostrukturach krystalicznych. Przedmiotem publikacji jest bowiem badanie wzrostu studni kwantowych heterostruktury za pomocą metodologii TEM oraz dyfrakcji promieni Roentgena. W szczególności chodzi o koncentrację pierwiastka indu (In) w laserowo aktywnej strukturze azotków galu. Na podstawie pomiaru odkształceń i stosowanej mechanicznej analizy numerycznej otrzymano profile studni kwantowych indu.

Ostatnia w serii prac publikacja [H6] poświęcona jest analizie wzrostu poprzecznego pasm tzw. depozytu ELO (Epitaxial Lateral Overgrowth – metoda poprzecznego narastania) na podłożu arsenu galu (GaAs). Na podstawie przeprowadzonej analizy deformacji układu uzyskano dobrą zgodność z eksperymentem i interpretację zachodzącego procesu narastania kryształów.

Oceniając wartość i oryginalność przedłożonego cyklu prac pragnę przede wszystkim podkreślić aktualność podjętej tematyki oraz niekonwencjonalność zagadnień prezentowanych w wymienionej serii. Należy bowiem zaznaczyć, iż jednym z wiodących kierunków badawczych współczesnej mechaniki materiałów jest jej silne powiązanie z fizyką na poziomie kwantowym i molekularnym oraz z komputerową nauką o materiałach (computational material science). Powstałe możliwości badawcze takie, jak pomiary z użyciem AFM (atomowy mikroskop siłowy), TEM (transmisyjny mikroskop elektronowy) itp., metody wytwarzania niekonwencjonalnych struktur materialnych jak np. epitaksja,

trawienie, litografia nanoskopowa itp. stworzyły podstawę dla nowych idei modelowania procesów deformacji i naprężeń. Wśród wielu metod opisu nanostruktur materialnych dają się zauważyć głównie trzy podejścia:

- I. Opis atomistyczny (kwantowy – ab initio, bądź molekularny)
- II. Opis mieszany molekularno-kontynualny (struktura materialna traktowana jako kontinuum, ale równania konstytutywne uwzględniają explicite oddziaływania intermolekularne)
oraz
- III. Opis kontynualny, w którym opis kinematyki i równań konstytutywnych oparty jest na formalizmie mechaniki kontinuum, ale źródłem deformacji i rozkładu sił wewnętrznych są zjawiska fizyczne, chemiczne, elektryczne i inne zachodzące w nanoskali.

Prace Kandydata wpisują się w ten III nurt modelowania. Wszystkie prace cyklu dotyczą nanostruktur krystalicznych z efektami nukleacji dyslokacji, rozmiarów rdzenia, niedopasowania sieci, narastania warstw epitaksjalnych, pola elektrycznego indukowanego dyslokacjami.

Prezentowany jako przedmiot rozprawy cykl prac jest interesującym i efektywnym przykładem zastosowania współczesnego formalizmu mechaniki z jej silnymi metodami obliczeniowymi do analizy procesów deformacji w nanoskali. Poziom tych prac oceniam wysoko – ukazały się one w czasopismach naukowych wysokiej rangi i były wielokrotnie cytowane. Za oryginalne i godne podkreślenia rezultaty uznaję:

- efektywne rozwiązanie problemu odkształceń plastycznych w ośrodkach krystalicznych z dyslokacjami przy założeniu anizotropii materiału, dużych odkształceń i dużych obrotów sieci (H1)
- efektywne wyznaczenie pola elektrycznego wywołanego dyslokacją (H2)
- opracowanie metody wyznaczania parametrów sieci krystalicznej na podstawie pomiarów TEM (H3)
- wprowadzenie do opisu procesu odkształceń dodatkowego gradientu deformacji odpowiadającego za przyrost masy w procesie narastania epitaksjalnego (H3)
- efektywne wyznaczenie rozmiarów rdzenia oraz energii dyslokacji (H4)
- deformacyjną interpretację wzrostu studni kwantowych z wykorzystaniem metodologii TEM (H5)
- wyznaczenie wygięcia struktur epitaksjalnych w procesie narastania warstw (H6)
- efektywną analizę numeryczną złożonych nieliniowych problemów brzegowych, wymagającą dużej inwencji, staranności, krytycyzmu i szeregu własnych kodów komputerowych
- za szczególnie cenne uważam współpracę oraz silne sprzężenie analizy numerycznej z metodami oraz interpretację subtelnych pomiarów TEM.

Rezultaty wszystkich prac cyklu zostały osiągnięte w wyniku wnikliwej i starannej analizy numerycznej wzbogaconej własnymi kodami. Analiza ta wymagała opracowania oraz implementacji zarówno poszczególnych elementów MES, jak i całej procedury obliczeń. Jest to niewątpliwie zasługa Kandydata.

Jednakże tylko prace (H1) i (H3) prezentują krótko niektóre macierze MES, dlatego uważam, że w Autoreferacie należało szczegółom algorytmu obliczeń (definicje i postacie macierzy itp.) poświęcić więcej miejsca. Nie zmienia to jednak ogólnie dobrego wrażenia o wartości tych prac.

4. Konkluzja

Oceniając całokształt dorobku i osiągnięć Kandydata stwierdza, iż:

1. Dorobek publikacyjny wsparty aktywnym uczestnictwem w realizacji wielu projektów badawczych o niekonwencjonalnej tematyce - jest wartościowy, reprezentuje wysoki poziom naukowy i rozpowszechniony został w renomowanych czasopismach naukowych
2. Monotematyczny cykl publikacji przedstawiony do odrębnej ceny jest opracowaniem o dużej wartości poznawczej. Analiza numeryczna autorstwa Kandydata umożliwiła rozwiązanie postawionych zadań i stanowi wkład w rozwój metod modelowania i analizy złożonych struktur nanoskopowych
3. Kandydat wykazał dobrą znajomość współczesnych metod zarówno modelowania, jak i pomiaru wielkości decydujących o przebiegu złożonych procesów w nanoskali. Wykazał przy tym umiejętność oraz przygotowanie do niezbędnej i efektywnej współpracy interdyscyplinarnej.

Wymienione okoliczności kwalifikują, moim zdaniem, Kandydata do ubiegania się o uzyskanie stopnia naukowego doktora habilitowanego. Wnoszę zatem o pozytywne rozstrzygnięcie postępowania habilitacyjnego i nadanie Dr Grzegorzowi MACIEJEWSKIEMU stopnia doktora habilitowanego w dyscyplinie Mechanika.

