

Prof. dr hab. inż. Paweł Dłużewski

Pracownia Metod Komputerowych Inżynierii Materiałowej

Zakład Metod Komputerowych

<http://www.ippt.gov.pl/~pdluzew>

dyscypliny: mechanika/inżynierii materiałowa

Kontynuualno-atomistyczne modelowanie naprężeń rezydualnych i pól sprzężonych w półprzewodnikach oraz metalach i ich stopach

Praca dotyczy modelowania dyfuzji oraz efektów piezoelektrycznych w niejednorodnych chemicznie kryształach. Zgodnie z prawem Vegarda, niejednorodne stężenie składników chemicznych w sieci kryształów powoduje bardzo wysokie naprężenia przekraczające lokalnie w nanostrukturach poziom 1GPa. Z uwagi na skokowy charakter zmian składu chemicznego, n. p. w kropkach kwantowych, gradient zmiany naprężeń rezydualnych jest niekiedy rzędu GPa/nm. Tak wysoki gradient jest źródłem wielu efektów fizycznych nie obserwowanych w skali mikrometrycznego niedopasowania. Może np. wywoływać tzw. dyfuzję naprężeniową. Z termodynamicznego punktu widzenia ten gradient pola naprężeń stanowi siłę napędową dla dyfuzji. W dobie szybkiego rozwoju elektroniki innym efektem ważnym technologicznie jest powstawania bardzo silnych wbudowanych pól elektrycznych wynikających z efektu piezoelektrycznego. Z technologicznego punktu widzenia wspomniany gradient naprężeń rezydualnych zaburza poziom przerwy energetycznej na obiektach kwantowych, takich jak: n. p. kropki i studnie kwantowe w urządzeniach optoelektrycznych, np. w diodach i laserach niebieskiej optoelektroniki.

Do modelowania tego typu pól sprzężonych w metodzie elementów skończonych stosuje się tzw. izoparametryczne elementy skończone 2-go i 3-go rzędu, w których pierwsze i drugie gradienty funkcji kształtu są ciągłe wewnątrz elementów skończonych. Pozwala to wykorzystać te gradienty w równaniach konstytutywnych. W chwili podejmowania się tego tematu nie jest wymagana znajomość metody elementów skończonych, istotne są natomiast predyspozycje do programowania i debugowania kodu oraz znajomość podstaw geometrii różniczkowej, termodynamiki i teorii sprężystości. Temat obejmuje pracę z kodem źródłowym metody elementów skończonych. Przewiduje się pracę pod systemem GNU Linux.