

Prof. dr hab. inż. Waldemar Rachowicz
Instytut Informatyki
Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki
ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

Kraków, 3 stycznia 2020

Recenzja

związana z postępowaniem habilitacyjnym dr inż. Grzegorza Jurczaka

Podstawą formalną opracowania niniejszej recenzji jest pismo sekretarza Rady Naukowej IPPT PAN dr hab. inż. Zbigniewa Ranachowskiego z 21 listopada 2019 roku. Do listu dołączono następujące materiały:

- Kopia pisma przewodniczącego Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów Naukowych prof. Kazimierza Furtaka o powołaniu mnie w skład komisji habilitacyjnej.
- Autoreferat dr inż. Grzegorza Jurczaka.
- Uwierzytelniona kopia dyplomu potwierdzająca doktorat.
- Ankieta osiągnięć naukowych.
- Kopie 5 artykułów Kandydata prezentujących jego osiągnięcie naukowe.
- Dokumenty w wersji elektronicznej.

1. Sylwetka Kandydata

Dr. Grzegorz Jurczak ukończył w 1997 roku Wydział Budowy Maszyn i Lotnictwa Politechniki Rzeszowskiej, w której też był początkowo zatrudniony jako asystent. Stopień doktora nauk technicznych zdobył w Instytucie Podstawowych Problemów Techniki PAN w roku 2006. Z Instytutem jest związany od 1999 roku do dzisiaj.

2. Osiągnięcie naukowe

Habilitant przedstawił jako swoje osiągnięcie badawcze 5 artykułów naukowych związanych tematyką, której nadał tytuł: „Kontynuálne modelowanie pól sprzężonych w heterostrukturach piezoelektrycznych”. Słowo „kontynuálne” w tym tytule należy rozumieć jako modele z ciągłym opisem materii i pola elektrycznego za pomocą równań różniczkowych cząstkowych znanych z mechaniki ciał odkształcalnych i elektrostatyki w dielektrykach. Uwypuklenie tego stwierdzenia jest związane z tym, że analiza dotyczy bardzo małych obiektów o wymiarach nanometrowych. Tymi obiektami są tzw. kropki kwantowe, jeden z rodzajów heterostruktur półprzewodnikowych – połączeń dwu lub większej liczby kryształów piezoelektrycznych o różnym typie przewodnictwa. Rozpatrywane kropki kwantowe to ścięte ostrosłupy sześciolub czworokątne z azotku galu GaN zawieszane w matrycy z azotku glinu AlN.

Układ sieci krystalicznej w kropce jest ściśle związany z jej kształtem, podobnie jej położenie względem sieci krystalicznej matrycy dopuszcza trzy możliwości (określane jako:

polarna, semi-polarna i niepolarna). Zarówno matryca jak i kropka są anizotropowymi sprężystymi materiałami piezoelektrycznymi. Nawet przy braku zewnętrznych obciążeń czy pola elektrycznego w kropce i w jej otoczeniu występuje pewien niezerowy stan odkształceń i pole elektryczne. Znajomość tych pól, a w szczególności potencjału elektrycznego jest bardzo istotna. Odpowiednio zmienny rozkład potencjału sprawia bowiem, że kropka staje się pułapką dla nośników ładunku, które przejawiają wtedy zachowanie kwantowo-mechaniczne, manifestujące się własnościami optoelektrycznymi materiału zawierającego te heterostruktuury, np. kolorem wysyłanego światła. Rozwiązywanie numeryczne opisanych problemów piezoelektrycznych z uwzględnieniem różnych aspektów fizycznych jest tematem artykułów prezentowanych przez Habilitanta.

Jako technikę symulacji numerycznej przyjęto metodę elementów skończonych w jej podstawowym podejściu ciągłym Galerkin, tj. z użyciem sformułowań wariacyjnych z identycznymi funkcjami próbnymi i testowymi z przestrzeni funkcyjnej Sobolewa H^1 oraz z relaksacją rozwiązania przez całkowanie przez części równania równowagi i równania Poissona elektrostatyki. Fakt ten nie jest jawnie podany, możemy go raczej wywnioskować z zastosowania komercyjnego programu FEAP ze stworzonym przez Kandydata dodatkowym elementem do anizotropowej piezoelektryki.

Zastosowano anizotropowe związki konstytutywne, w podstawowym podejściu liniowe, zaś w podejściu rozszerzonym z ich wersją nieliniową. Jako obciążenie dające niehomogeniczne rozwiązanie występuje tzw. spontaniczna polaryzacja oraz niedopasowanie sieciowe dwu elementów heterostruktuury, a także dyslokacja prostoliniowa lub śrubowa w materiale matrycy, która objawia się obecnością ładunku wzdłuż linii dyslokacji.

Z punktu widzenia przybliżonego rozwiązywania stacjonarnych równań różniczkowych cząstkowych zadanie to nie przedstawia istotnych trudności numerycznych. Stopień anizotropii jest umiarkowany nie powodując niestabilności wymagających sformułowania mieszanego. Rozwiązania nie charakteryzują się też zbyt gwałtownymi zmianami w przestrzeni ani osobliwościami wymagającymi wyrafinowanych nierównomiernych siatek dyskretyzacyjnych, aby osiągnąć dobrą dokładność. Główną nowością pracy dr inż. Jurczaka jest rozwiązywanie zagadnień kropki kwantowej w pełnym zakresie ogólności, bez stosowania żadnych upraszczających założeń, które jak dotąd były zwykle stosowane w tego rodzaju symulacjach. Tę ogólność można wypunktować następująco:

1. Uwzględnienie pełnej anizotropii obydwu składników heterostruktuury (podejścia uproszczone używają przybliżeń izotropowych lub z ograniczoną anizotropią).
2. Uwzględnienie pełnego wzajemnego sprzężenia pól odkształceń i pola elektrycznego (uproszczenia ograniczały się do jednokierunkowego wpływu odkształceń na pole elektryczne).

3. Zastosowanie nieliniowego opisu odkształceń skończonych do kinematyki ciała stałego i uwzględnienie fizycznej nieliniowości zarówno sprężystości jak i piezoelektryki.
4. Dokładny opis geometrii kropki kwantowej dla jej trzech podstawowych lokalizacji względem sieci krystalograficznej matrycy.

Przeprowadzenie obliczeń z powyższym stopniem ogólności pozwoliło Habilitantowi (i współpracownikom) na ocenę dokładności alternatywnych analiz przyjmujących opisy uproszczone. Zaslugą dr. Jurczaka nie jest (jak już wspomniałem wcześniej) szczególna trudność symulacji numerycznych, lecz fakt ich pionierskiego zastosowania w przedmiotowej dziedzinie. Od tego momentu wyznaczony zostaje przez Kandydata nowy standard symulacji heterostruktur i można powiedzieć, że „nie będzie wypadło” już używać uproszczonych modeli (rozumiejąc to oczywiście w granicach zdrowego rozsądku). Tym bardziej, że w jednym z artykułów dr inż. Jurczak podał jawną postać transformacji stałych materiałowych piezoelektryki odpowiadających nieliniowości fizycznej dla różnych miar odkształceń używanych w skończonej sprężystości.

Wyszczególnienie konkretnych wyników naukowych otrzymanych za pomocą opisanych wyżej rozszerzonych modeli kropki kwantowej obejmuje następujące elementy:

1. Porównanie wyników modeli nieliniowych z uproszczonymi (wspomniane wyżej).
2. Ilościowe wyjaśnienie lepszych własności kropek niepolarnych i semi-polarnych w porównaniu z tymi o lokalizacji polarnej.
3. Określenie rozkładu potencjału elektrycznego w różnych konfiguracjach heterostruktury piezoelektrycznej.
4. Analiza wpływu dyslokacji na odkształcenia i potencjał w kropce kwantowej.
5. Określenie ogólnych transformacji stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu dla wybranych miar odkształceń skończonych (miar Biota, Greena i Henky'ego).

Uwagi krytyczne

Przeglądając artykuły o numerach 2-5 odniosłem niekorzystne wrażenie dotyczące ich hermetyczności, tj. skierowania wyłącznie do czytelników „z branży”. Objawia się to brakiem definicji niektórych z używanych symboli, pomijaniem wyjaśnienia przyczyn zastosowania niektórych kroków w rozumowaniach, braku wyjaśnienia znaczenia pewnych warunków, które pojawiają się bez uzasadnienia (przykładowo, w warunkach brzegowych obok relacji obowiązujących na brzegu znajdujemy związki dotyczące obszaru trójwymiarowego).

W jakimś stopniu zniechęcającym dla mnie elementem tych prac jest brak sformułowań wariacyjnych, które faktycznie rozwiązuje się metodą elementów skończonych. Jeśli formy dwuliniowe prowadzące do macierzy sztywności są łatwe do wyobrażenia, to w przypadku funkcjonału liniowego odpowiedzialnego za złożone obciążenie jego forma nie jest już tak

oczywista. Tymczasem jawna, wypisana postać takiego funkcjonału liniowego usunęłaby wszelkie wątpliwości dotyczące opisu zagadnienia brzegowego. A wątpliwości takie nasuwają się ze względu na wspomnianą wyżej hermetyczność opisów w artykułach. Co więcej, przedstawienie sformułowania słabego dałoby czytelnikowi możliwość oceny poprawności postawienia zadań, jeśli mogłoby ono wzbudzać podejrzenia.

Przykładowo, w artykule #2 jest rozpatrywany ładunek rozłożony wzdłuż linii dyslokacji. Wydaje się to być błędne z punktu widzenia sformułowania w przestrzeni H^1 , gdyż funkcjonał oparty o taki rozkład nie jest ciągły w normie tej przestrzeni. W praktyce jego użycie objawiałoby się brakiem zbieżności rozwiązań numerycznych, choć mogłyby one wyglądać zgodnie z intuicją. Istnieją możliwości specjalnego obejścia tej trudności, ale artykuł milczy w sprawie sformułowania słabego, więc nie ma sposobności oceny, czy stosowana procedura jest poprawna. Wspomnę jeszcze, że w przywołanym artykule nie ma informacji, czy dyslokacja daje jakieś wymuszenie w równaniu mechaniki, które podpowiada intuicja, jako że z dyslokacją wiążą się lokalne odkształcenia sieci.

Przy lekturze artykułów pojawia się podejrzenie, iż nie były one z właściwą uwagą recenzowane (mimo uznanej renomy czasopism). Sugeruje to pozostawienie w nich bardzo rzucających się w oczy błędów językowych, które nie powinny się znaleźć w finalnych wersjach manuskryptów.

4. Istotna aktywność naukowa

W okresie po doktoracie czyli od 2006 do 2018 roku Habilitant oprócz omówionej wcześniej aktywności naukowej związanej z recenzowanym osiągnięciem naukowym, współtworzył prace związane ze wsparciem numerycznym różnych wyników eksperymentalnych dotyczących badań materiałowych, w tym także badań heterostruktur. W pracach tych jego wkład polegał w głównej mierze na wykorzystaniu symulacji numerycznych dla rozpatrywanych modeli zjawisk badanych doświadczalnie. Te zjawiska to dyslokacje (i ich rekonstrukcja), indentacja materiału służąca na przykład pomiarowi jego twardości, zachowanie się heterostruktur w różnych warunkach fizycznych. Prace te opublikowano w 5 artykułach w czasopismach z listy JCR, przy czym 3 z nich to czasopisma o wyższym statusie z Impact Factor > 2, a także w 7 artykułach spoza listy JCR. Dr inż. Jurczak wygłosił w tym czasie 11 referatów na konferencjach naukowych i był współautorem 8 innych referatów.

Przedstawioną tu aktywność naukową Kandydata w okresie 2006-2018 należy ocenić jako bardzo dobrą w jego dziedzinie. Dodatkowo Habilitant był wykonawcą w 4 projektach badawczych, w tym w jednym europejskim. Po doktoracie dr inż. Jurczak odbył roczny staż na Uniwersytecie Paula Cézanne'a Aix-Marseille III we Francji.

Był sekretarzem komitetu organizacyjnego 3rd International Conference of Material Modelling w 2013 roku. Dorobek dr inż. Jurczaka w zakresie edukacji i popularyzacji nauki jest skromny ze względu na zatrudnienie w placówce nie związanej z masową edukacją.

5. Wnioski końcowe

Habilitant przedstawił interesujące i wartościowe osiągnięcie naukowe związane z badaniem ważnego elementu współczesnej techniki: półprzewodnikowych heterostruktur piezoelektrycznych. Zaprezentował w nim zaprojektowane przez siebie narzędzia numeryczne do analizy takich struktur w pełnej ogólności, z uwzględnieniem nieliniowości zjawisk, całkowitego (dwustronnego) sprzężenia piezoelektrycznego oraz anizotropii materiałów. W ten sposób stał się pionierem stosowania tak ogólnych modeli w dziedzinie analizy heterostruktur i w pewnym sensie wyznaczył standard prowadzenia takich symulacji w przyszłości także dla innych badaczy.

Aktywność naukowa Kandydata dokumentowana liczbą jego publikacji (z dużą liczbą obcych cytowań: 186 i z indeksem Hirscha $H=5$), udziałem w konferencjach naukowych oraz udziałem w projektach badawczych wskazuje na jego energię i entuzjazm do prowadzenia działalności badawczej obecnie i w przyszłości. Posiada on niewątpliwie zdolność pracy w zespole – większość jego wyników ma charakter współautorski, znajduje się też dobrze we współpracy międzynarodowej. Uważam, że zarówno omówione w tej recenzji osiągnięcie naukowe dr inż. Grzegorza Jurczaka jak i jego aktywność jako badacza, pozwalają mi rekomendować go do nadania mu stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk technicznych.

Waldemar Radowski