

Recenzja rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego dr Grzegorza Maciejewskiego p.t. „Numeryczna analiza deformacji struktur krystalicznych i ich defektów na poziomie nanoskali”

1. Postać (forma) przedstawienia rozprawy habilitacyjnej

Dr Grzegorz Maciejewski zaproponował (zgodnie z ustawą z dnia 14.03.2003 wraz z późniejszymi zmianami) formę rozprawy habilitacyjnej jako zbiór sześciu prac naukowych opublikowanych w międzynarodowych czasopismach naukowych w latach 2004-2008. Prace te są ujęte pod wspólnym tytułem:

„Numeryczna analiza deformacji struktur krystalicznych i ich defektów na poziomie nanoskali”. Współautorami tych prac jest dwanaście osób, których indywidualny wkład do poszczególnych artykułów jest bardzo zróżnicowany. Współautorzy w podanych oświadczeniach starali się przedstawić szczegółowo ich indywidualny wkład i zakres pracy, który wnieśli w powstanie poszczególnych artykułów. Ocenę wkładu Autora habilitacji postaram się szczegółowo zanalizować w punktach dotyczących treści i analizy rezultatów rozprawy. Jest to bardzo istotne do obiektywnej i rzeczowej oceny rezultatów naukowych dr Grzegorza Maciejewskiego.

Dr Grzegorz Maciejewski w punkcie 1.3 Autoreferatu przedstawił zbiór tych prac jako H1–H6. W dalszym ciągu recenzji będę je również cytował jako H1–H6.

2. Cel rozprawy habilitacyjnej

Głównym celem rozprawy habilitacyjnej (składającej się ze zbioru prac H1–H6) jest rozwinięcie i naukowe zastosowanie metody mechaniki komputerowej do analizy deformacji struktur krystalicznych i ich defektów na poziomie nanoskali.

Defekty struktury (dyslokacje i wiele innych defektów) odgrywają bardzo ważną rolę w urządzeniach nanowymiarowych przede wszystkim z powodu na wpływ na mechaniczne i fizyczne parametry urządzeń. W przedstawionych pracach H1–H6 jako rozprawa habilitacyjna opracowano nową koncepcję do wyznaczenia naprężeń wywołanych przez niskoenergetyczną granicę dyslokacyjną (por. praca H1). Natomiast deformacje wywołane przez pojedynczą linię dyslokacyjną były opracowane w publ. H4. Oszacowania rozkładu pola elektrycznego wywołanego przez dyslokację krawędziową poprzez sprzężenie mechaniczno-elektryczne zostało przedstawione w pracy H2, gdzie pole elektryczne obliczono na podstawie eksperymentalnie wyznaczonego pola odkształcenia.

W pracach H3, H5 i H6 zbadano deformacje wynikające z niedopasowania sieciowego warstw heterostruktury krystalicznej oraz z niejednorodności rozkładu materiału.

W pracy H3 skupiono się na zbadaniu niesprężystej relaksacji cienkich warstw.

Przedstawiono numeryczną metodę opisu geometrycznego nieliniowych deformacji cienkich warstw. Dla pełnego naukowego zanalizowania deformacji nanokrystalicznych warstw InGa_N, modelowanie numeryczne zostało zintegrowane z jakościową wysokorozdzielczą mikroskopią elektronową (por. praca H5). Wykorzystanie synergetycznych rezultatów obu metod umożliwiło interpretację rozkładu indu w analizowanych warstwach InGa_N. Zaproponowane modelowanie numeryczne w pracy H6

potwierdziło interpretacje doświadczalne dotyczące wpływu niejednorodnego domieszkowania krzemu w warstwach epitaksjalnych o wzroście poprzecznym na wygięcie skrzydeł tych warstw. Rezultaty symulacji numerycznych w pewien sposób pomogły w interpretacji danych eksperymentalnych.

3. Analiza rezultatów rozprawy habilitacyjnej

Rozpoczynając analizę uzyskanych rezultatów rozprawy habilitacyjnej dr Grzegorza Maciejewskiego warto podkreślić, że cztery prace H2, H3, H4, H5 zostały wykonane w wyniku współpracy zespołu w ramach kierowanego przez Niego grantu („Wpływ warunków wzrostu epitaksjalnego na samonapężenia, pękanie i formowanie się kropek kwantowych w warstwach azotkowych”). Indywidualny wkład pracy Autora habilitacji przede wszystkim w pomysł koncepcji przeprowadzonych badań i wybór metod realizacji tych prac jest bardzo istotny.

Przedstawmy teraz rezultaty naukowe i ich analizę uzyskane w zbiorze prac H1–H6 stanowiących rozprawę habilitacyjną.

W pracy H1 zaprezentowana została nowa koncepcja badań do wyznaczenia naprężeń wywołanych przez dyslokacje w materiale anizotropowym. Opracowano metodę numerycznego wyznaczania pola naprężeń wywołanego przez założony rozkład dyslokacji oraz praktyczne wykorzystanie kontynualnej teorii dyslokacji w celu uzyskania nie tylko jakościowego ale i ilościowego opisu deformacji na poziomie nanoskali. Opis uwzględnia nie tylko symetryczną część niesprężystych dystorsji, ale również niesymetryczną. Trzeba zaznaczyć, że przedstawiona koncepcja uwzględnia pełną anizotropię materiału, założoną geometrię próbki, jak również efekty skończonych deformacji.

Praca H1 jest rezultatem współpracy dr Grzegorza Maciejewskiego z prof. Pawłem Dłużewskim. Wykorzystana została propozycja opracowanego wcześniej algorytmu badań przez prof. P. Dłużewskiego.

W pracy H2 zaprezentowana została nowa koncepcja badań do wyznaczenia pola elektrycznego wokół dyslokacji. Pole elektryczne wokół dyslokacji zostało wyznaczone dwoma sposobami:

- (i) Wyznaczenie pola odkształceń sprężystych na podstawie wysokorozdzielczej mikroskopii elektronowej (HRTEM);
- (ii) Przy wykorzystaniu metody fazy geometrycznej numerycznego wyznaczenia rozkładu potencjału elektrycznego.

Powyższa analiza może dostarczyć cztery składowe tensora dystorsji sieci. Dzięki efektowi piezoelektrycznego odkształcenia generowane jest pole elektryczne. W ten sposób, po wyznaczeniu pola odkształceń sprężystych można dzięki sprzężeniu piezoelektrycznemu wyznaczyć rozkład pola elektrycznego.

Warto dodać, że próbki do obserwacji mikroskopowych zostały wykonane przez P. Ruterana (CNRS-ENSICAEN, Caen, Francja), natomiast analizę metodą fazy geometrycznej wykonał S. Kret (Instytut Fizyki, PAN, Warszawa). Dr Grzegorz Maciejewski był pomysłodawcą badań, wykonał modelowanie numeryczne (wykorzystując nieliniową metodę elementów skończonych) i przeprowadził implementację numeryczną.

W pracy H3 zbadano przykład częściowo zrelaksowanej heterostruktury azotkowej. Promień wygięcia próbki zmierzono przy użyciu miernika laserowego własnej produkcji. Parametry sieci warstw krystalograficznych zmierzono za pomocą dyfrakcji rentgenowskiej w kierunku równoległym i prostopadłym do kierunku wzrostu $[0\ 0\ 0\ 1]$.

Dwa elementy zaproponowanej metody badań mają aspekty nowości w stosunku do wcześniejszych założeń przyjmowanych w literaturze:

- (i) Wprowadzenie założenia, że gęstość dyslokacji na górnej powierzchni warstwy jest połową gęstości dyslokacji na jej dolnej powierzchni. Autorzy pracy podkreślają, że mechanizm relaksacji jest złożony i mocno zależy od warunków wzrostu epitaksjalnego, grubości poszczególnych warstw i wielu innych parametrów. Dlatego sugerują, że przyjęcie powyższego założenia należy traktować jako przybliżone, które wpływa na prostotę opisu deformacji. Jest jednak uzasadnione niedostateczną wiedzą o mechanizmach rządzących relaksacją nanostruktury.
- (ii) Uwzględnienie zależności objętości warstwy kryształu (masy) podczas wzrostu epitaksjalnego z fazy gazowej lub ciekłej od ilości kolumn atomowych podłoża. Istotne jest, że nukleacja dyslokacji niedopasowania na powierzchni rozdziału warstwa/podłoże powoduje wzrost ilości kolumn atomowych rosnącej warstwy, lub zmniejszanie, w zależności od kierunku wektora Burgersa. Stąd konieczne jest wprowadzenie parametru opisującego dodatkową masę warstw (w stosunku do warstwy wzrastającej na podłożu bez dyslokacji).

Stopień zrelaksowania warstw otrzymano poprzez numeryczne dopasowanie krzywizny próbki do krzywizny zmierzonej eksperymentalnie. Uzyskana bardzo dobra zgodność wyników modelowania z eksperymentalnie zmierzonymi parametrami sieciowymi (wykorzystując dyfrakcję rentgenowską) pozwala wnioskować, że zaproponowana w pracy H3 metoda będzie użyteczna do opisu parametrów sieciowych częściowo zrelaksowanych warstw epitaksjalnych.

Trzeba podkreślić, że pomysł metody badań przedstawiony w pracy H3 należał do Autora habilitacji, jak również opracowanie modelu numerycznego, analiza numeryczna i interpretacja rezultatów.

Praca H4 jest jedną pracą opublikowaną samodzielnie przez dr Grzegorza Maciejewskiego w zbiorze prac przedstawionych jako Jego rozprawa habilitacyjna. W pracy H4 została zaproponowana metoda badań, która umożliwi precyzyjne wyznaczenie energii rdzenia dyslokacji oraz rozmiaru fizycznego rdzenia dyslokacji. Wykorzystano kontynuálną teorię dyslokacji oraz metodę elementów skończonych. Przedstawiony został przykład opisu energetycznego dyslokacji śrubowej w krzemie. Wyznaczona została energia rdzenia dyslokacji. Weryfikację poprawności zaproponowanej metody przeprowadzono poprzez porównanie uzyskanych rezultatów z analogicznymi z dynamiki molekularnej. Dobra zgodność rezultatów pozwala wyciągnąć wniosek, że zaproponowana metoda badań może rozszerzyć stosowalność metod mechaniki kontinuum. Autor jednak dodaje, że pełne sprawdzenie zaproponowanej metody wymaga znacznie szerszych badań.

Autor habilitacji określił bardzo precyzyjnie cel dwu ostatnich prac ze zbioru składającego się na habilitację, tzn. H5 i H6. Prace te mają charakter interdyscyplinarny i ich celem było takie modelowanie komputerowe nanostruktur by umożliwić uzyskanie nowych informacji eksperymentalnych lub by ułatwić interpretację już otrzymanych rezultatów z obserwacji doświadczalnych.

W pracy H5 przedstawiono szeroką analizę wyznaczenia koncentracji indu w warstwach $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ na podstawie obrazów wysokorozdzielczej mikroskopii elektronowej (HRTEM). Jednocześnie wykonano bezpośrednie porównanie wyników z analizy mikroskopowej z wynikami dyfrakcji rentgenowskiej na tych samych próbkach. Uzyskano opis struktury krystalograficznej studni kwantowych InGaN/GaN

wzrastających na niskodefektowych podłożach kryształu GaN. W zanalizowanych symulacjach wzięto pod uwagę efekty relaksacji cienkiej folii, warunki brzegowe podczas obserwacji mikroskopowej, geometrię wielokrotnych studni kwantowych, nieliniowe efekty geometryczne deformacji możliwe do opisanie w ramach formalizmu skończonych deformacji. Przeprowadzone obliczenia metodą elementów skończonych pozwoliły na określenie deformacji cienkiej folii, a połączone z symulacjami obrazów mikroskopowych umożliwiły oszacowanie rozmycia interfejsu międzyfazowego. Obrazy mikroskopowe wytworzone poprzez symulacje numeryczne były porównane z obrazami mikroskopowymi uzyskanymi z eksperymentu.

Współautorami pracy H5 jest osiem osób. Pomysł koncepcji pracy był zasługą S. Kreta, który także koordynował współpracę grupy. Autor habilitacji był odpowiedzialny za modelowanie numeryczne. Próbkę wykonano i opisano w Instytucie Wysokich Ciśnień, PAN i w firmie TopGaN. Obserwacje mikroskopowe i analiza HRTEM były wykonane przez autorów z Instytutu Fizyki, PAN w Warszawie (głównie przez S. Kreta). Artykuł jest rezultatem współpracy w ramach grantu pod kierunkiem dr G. Maciejewskiego.

Praca H6 przynosi studium odkształceń w warstwie GaAs : Si rosnącej przy użyciu epitaksji z fazy ciekłej metodą poprzecznego narastania (ELO – liquid phase epitaxial lateral overgrowth) na podłożu GaAs maskowanym SiO₂. Dyfrakcji rentgenowskiej użyto do pomiaru kształtu płaszczyzn pasków ELO. Badanie doświadczalne wykazało, że gdy maska SiO₂ zostanie usunięta, swobodne skrzydła ELO wyginają się ku górze. Wygięcie to spowodowane jest działającymi naprężeniami residualnymi. Źródła powstawania naprężeń residualnych upatrywano w niejednorodnym domieszkowaniu krzemem. Aby sprawdzić te hipotezę przeprowadzone zostały badania modelowania relaksacji swobodnych skrzydeł ELO. Przyjęto uproszczony model skrzydła. Odkształcenia niedopasowania wynikające z niejednorodnego domieszkowania krzemem w części skrzydła przyjęte zostały jako odkształcenia niesprężyste. Model mechaniczny został uproszczony do dwuwymiarowego. Wyniki symulacji numerycznych wykazały, że niedopasowanie sieciowe na połączeniu skrzydło/podłoże ma istotny wpływ na kształt wygięcia płaszczyzn skrzydła. Dzięki włączeniu do opisu powyższego niedopasowania, w symulacjach otrzymano zakrzywienia płaszczyzn sieciowych zgodne z rezultatami obserwacji doświadczalnych.

Pomysł koncepcji pracy został zaproponowany przez Z. Żytkiewicza (Instytut Fizyki, PAN, Warszawa). On i członkowie jego grupy przeprowadzili wszystkie elementy analizy poza modelowaniem numerycznym. Model mechaniczny skrzydła ELO, założenia upraszczające, oprogramowanie elementu skończonego oraz przeprowadzenie symulacji komputerowych zostały wykonane przez dr G. Maciejewskiego.

4. Uwagi krytyczne

Chciałbym postawić bardzo ważne pytanie, czy zaproponowana nieliniowa metoda elementów skończonych zapewnia jednoznaczność rozwiązania rozważanych problemów? Pytanie jest bardzo istotne, bowiem dotyczy kilku prac ze zbioru H1–H6, będących rozprawą habilitacyjną. W szczególności dotyczy prac H3, H5 i H6, w których uwzględnia się skończone deformacje, co natychmiast wpływa na nieliniowość rozważanych algorytmów numerycznych i w efekcie podstawowe równania opisujące rozważane problemy początkowo-brzegowe przy pomocy metody elementów skończonych też są nieliniowe.

Z rozważań dotyczących jednoznaczności i stabilności w metodach elementów skończonych wiemy, że jednoznaczność rozwiązania została udowodniona tylko przy założeniu liniowości. Tymi zagadnieniami zajmowało się wielu autorów, wystarczy

jednak wymienić najbardziej znanych: I. Babuska, T.J.R. Hughes, J.T. Oden, L. Demkowicz (por. np. L. Demkowicz, Discrete Stability, DPG Method and Least Squares, Kongres Mechaniki Polskiej, Poznań, Aug. 30 – Sept. 1, 2011).

Autor habilitacji tego problemu nie analizuje, a są to zagadnienia podstawowe, które mogą wpływać na uzyskane wnioski z rozwiązań numerycznych. Dlatego potrzebny jest tu szeroki komentarz na ten temat.

Drugie podstawowe pytanie dotyczy przyjętego założenia w pracy H3 o gęstości dyslokacji na jej dolnej powierzchni. Czy to założenie nie jest zbyt daleko idącym uproszczeniem rozważań? Potrzebny jest tu również chyba znacznie głębszy komentarz, niż został przedstawiony w Autoreferacie.

Trzecie pytanie dotyczy pracy H4. Czy Autor po wyciągnięciu słusznego wniosku, że pełne sprawdzenie zaproponowanej metody w tej właśnie pracy wymaga znacznie szerszych badań, podjął takie badania i czy je opublikował.

5. Ocena rozprawy habilitacyjnej

Główny cel rozprawy, a mianowicie rozwinięcie i naukowe zastosowanie metody mechaniki komputerowej do analizy deformacji struktur krystalicznych i ich defektów na poziomie nanoskali został przez dr Grzegorza Maciejewskiego zrealizowany.

Rozprawa habilitacyjna składająca się ze zbioru prac H1–H6 przynosi, co starałem się bardzo szczegółowo wykazać analizując uzyskane rezultaty, szerokie rozwinięcie i zastosowanie metody komputerowej do bardzo różnie przedstawionej analizy deformacji nanostruktur i ich różnych defektów. Artykuły H1–H6 mają charakter interdyscyplinarny, są dobrze zredagowane i zostały opublikowane w bardzo dobrych międzynarodowych czasopismach naukowych.

Jednocześnie chciałbym podkreślić bardzo dobrą współpracę dr Grzegorza Maciejewskiego z grupami badaczy naukowych z Instytutu Fizyki, PAN w Warszawie, czy z Instytutu Wysokich Ciśnień, PAN.

Rezultaty otrzymane w tych artykułach, a więc w rozprawie habilitacyjnej dr Grzegorza Maciejewskiego, stanowią bezpośredni wkład do rozwoju naukowego mechaniki ciała stałego na poziomie nanoskali. Można jednocześnie oczekiwać, że przyczynią się również do szerokiego wykorzystania w nowoczesnej praktyce dotyczącej inżynierii materiałowej w zakresie nanostruktur.

6. Ocena dorobku naukowego

Dr Grzegorz Maciejewski (ur. 23.11.1969) ukończył studia magisterskie uzyskując stopień magistra inżyniera budownictwa w zakresie specjalności teoria konstrukcji w Wyższej Szkole Inżynierskiej w Opolu w 1993 roku. Stopień doktora nauk technicznych w zakresie mechaniki uzyskał w IPPT PAN, Warszawa, 2003 roku, broniąc pracę doktorską n.t. „Zastosowanie metody elementów skończonych do wyznaczania rozkładów naprężeń residualnych w heterostrukturach”, której promotorem był prof. dr hab. Paweł Dłużewski. Od 1995 roku jest zatrudniony w IPPT PAN jako asystent, a od 2003 roku jako adiunkt. Opublikował 20 artykułów naukowych w bardzo dobrych czasopismach (większość z listy filadelfijskiej) oraz 8 artykułów w tomach konferencyjnych. Brał udział w wielu konferencjach naukowych w kraju i zagranicą. Uczestniczył w realizacji kilku grantów naukowych oraz kierował dwoma grantami.

Rozwój naukowy dr Grzegorza Maciejewskiego jest bardzo konsekwentny.

Jego zainteresowania naukowe są skoncentrowane na trzech głównych zagadnieniach:

- (i) Numeryczna analiza deformacji struktur krystalicznych i ich defektów na poziomie nanoskali.
- (ii) Energia i dyssypacja w austenityczno-martenzytycznej fazie transformacji.
- (iii) Rozwijanie metod porównania transformacji elektronowo mikroskopowej, rentgenowskiej dyfrakcji i numerycznej analizy komputerowej.

Te trzy główne kierunki badań były przez dr Grzegorza Maciejewskiego bardzo aktywnie rozwijane. Dotychczas uzyskane rezultaty badań naukowych mają charakter interdyscyplinarny i dotyczą nowych zagadnień w nanomechanice.

Pierwszy kierunek badań został uwieczniony zebraniem H1–H6 prac, które stanowią rozprawę habilitacyjną. Trzeba dodać, że dr Grzegorz Maciejewski współpracuje naukowo z wieloma badaczami z IPPT PAN, z Instytutu Fizyki, PAN oraz z Instytutu Wysokich Ciśnień, PAN. Jego współpraca jest bardzo owocna i wyraźnie się rozwija. Dotyczy bardzo istotnej problematyki naukowej i przynosi nowe rezultaty, które mają duże znaczenie naukowo-poznawcze jak również rokują możliwość szerokiego wykorzystania w nowoczesnej nanostrukturalnej praktyce inżynierskiej.

7. Wniosek końcowy

Biorąc pod uwagę moją dobrą ocenę rozprawy habilitacyjnej dr Grzegorza Maciejewskiego p.t. „Numeryczna analiza deformacji struktur krystalicznych i ich defektów na poziomie nanoskali” (zbiór prac H1–H6) oraz dobrą ocenę Jego dorobku naukowego uważam, że zostały spełnione wszystkie warunki aby dopuścić Go do postępowania habilitacyjnego w Instytucie Podstawowych Problemów Techniki PAN.



Piotr Perzyna

Warszawa, dnia 3 listopada 2012