

dr inż. Grzegorz Jurczak  
Zakład Informatyki i Nauk Obliczeniowych  
Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN  
ResearcherID: V-7296-2018  
Scopus Author ID: 6603145013  
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6978-8639>

Załącznik nr 3 do wniosku  
o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego

## Autoreferat

### 1. Imię i Nazwisko

**Grzegorz Jurczak**

### 2. Posiadane dyplomy i stopnie naukowe

- 2006** - stopień doktora nauk technicznych w zakresie mechaniki nadany przez Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN,  
promotor: dr hab. inż. Paweł Dłużewski  
recenzenci: prof. dr hab. inż. Tomasz Łodygowski  
dr hab. inż. Ryszard Pęcherski
- 1997** - stopień magistra nadany przez Wydział Budowy Maszyn i Lotnictwa Politechniki Rzeszowskiej (praca magisterska z wyróżnieniem)  
promotor: prof. dr hab. inż. Henryk Kopecki

### 3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

- 2015-** - specjalista w Zakładzie Nauk Komputerowych Instytutu Podstawowych (obecnie Zakład Informatyki i Nauk Obliczeniowych)
- 2007-2015** - adiunkt w Zakładzie Nauk Komputerowych Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN
- 2006-2007** - postdoc na Uniwersytecie Paul Cezanne w Marsylii
- 2003-2006** - asystent w Zakładzie Nauk Komputerowych Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN
- 1999-2003** - studia doktoranckie w Instytucie Podstawowych Problemów Techniki PAN
- 1996-1997** - asystent w Zakładzie Mechaniki Technicznej Wydziału Budowy Maszyn i Lotnictwa Politechniki Rzeszowskiej

### 4. Wskazanie osiągnięcia\* wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. 2016 r. poz. 882 ze zm. w Dz. U. z 2016 r. poz. 1311.):

a) tytuł osiągnięcia naukowego:

**Kontynualne modelowanie pól sprzężonych w heterostukturach piezoelektrycznych**

b) Publikacje lub inne prace wchodzące w skład osiągnięcia naukowego:

1. Jurczak G., Variation of second-order piezoelectric coefficients with respect to a finite strain measure, *Acta Crystallographica Section A FOUNDATIONS AND ADVANCES* (2018) **A74**, pp.518-523, DOI: 10.1107/S2053273318008628, **IF 7.930**;
2. Jurczak G., Dłużewski P., Finite element modelling of threading dislocation effect on polar GaN/AlN quantum dot, *PHYSICA E-LOW-DIMENSIONAL SYSTEMS & NANOSTRUCTURES* (2018) **95**, pp.11-15, DOI: 10.1016/j.physe.2017.08.018, **IF 2.399**;
3. Jurczak G., Dłużewski P., Finite element modelling of nonlinear piezoelectricity in wurtzite GaN/AlN quantum dots, *COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE* (2016) **111**, pp.197-202, DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.09.024, **IF 2.292**;
4. Jurczak G., Young T.D., Finite element modelling of semi and nonpolar GaN/AlN quantum dots, *APPLIED SURFACE SCIENCE* (2012) **260**, pp.59-64, DOI: 10.1016/j.apsusc.2012.04.005, **IF 2.112**;
5. Young T.D., Jurczak G., Lotsari A., Dimitrakopoulos G.P., Komninou Ph., Dłużewski P., A study of the piezoelectric properties of semipolar (11-22) GaN/AlN quantum dots, *PHYSICA STATUS SOLIDI B - BASIC SOLID STATE PHYSICS* (2015) **252(10)**, pp.2296-2303, DOI: 10.1002/pssb.201552156, **IF 1.522**;

c) omówienie celu naukowego/artystycznego ww. pracy/prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania.

Intensywny rozwój technologiczny obserwowany w ostatnich dekadach w przemyśle elektronicznym wraz z postępującą miniaturyzacją urządzeń półprzewodnikowych skutkuje wzmożonym zainteresowaniem badaniami heterostruktur półprzewodnikowych na poziomie nanoskali. Jednakże, w trakcie postępującej miniaturyzacji urządzeń elektronicznych natrafiono na wiele problemów technologicznych wynikających z malejących rozmiarów heterostruktur. Ze względu na rosnące w szybkim tempie koszty wytwarzania jak i badań eksperymentalnych takich struktur, coraz ważniejszą rolę w procesie poznawczym odgrywają symulacje komputerowe. Trend taki obserwowany jest również w dziedzinie mechaniki. Symulacje komputerowe pozwalają wyjaśnić i przewidzieć takie a nie inne zachowanie się materiałów w skali nano, przy czym koszt takich badań jest znacząco niższy w porównaniu z badaniami eksperymentalnymi. Pozwalają one szybciej i niższym kosztem ocenić przydatność całego wachlarza możliwych rozwiązań i do dalszych badań uwzględniających kosztowne eksperymenty zakwalifikować jedynie kilka najbardziej obiecujących. Oczywiście, badania eksperymentalne pełnią kluczową rolę w badaniach naukowych a weryfikacja teorii opisujących zjawiska fizyczne za ich pomocą jest nieodzowna. Jednakże symulacje komputerowe stają się nieodłącznym i logicznym uzupełnieniem badań eksperymentalnych. Dlatego też, w celu adekwatnego odwzorowania fizycznych właściwości nanometrowych heterostruktur krystalicznych podczas modelowania, konieczne jest opracowanie nowych lub modyfikacja już istniejących modeli matematycznych ich zachowania. Nie inaczej jest w przypadku zjawiska piezoelektrycznego odkrytego pod koniec XIX wieku, a praktycznie zastosowanego po raz pierwszy kilkadziesiąt lat później, np. w pierwszych sonarach czy przetwornikach dźwiękowych. Obecnie, materiały piezoelektryczne mają mnóstwo zastosowań zarówno w przypadku przemysłu jak również domu. W przypadku badań naukowych, wiele eksperymentalnych technik badawczych

wykorzystuje efekt sprzężenia piezoelektrycznego, np. skaningowa mikroskopia tunelowa (ang. STM), czy mikroskopia sił atomowych (ang. AFM). W ostatnich latach główny nurt badań nad półprzewodnikami piezoelektrycznymi skupiony był na wykorzystaniu ich w optoelektronice, fotowoltaice, elektronice dużych mocy czy mikroelektromechanice (ang. MEMS). Osobnym, lecz nie mniej ważnym trendem jest postępująca miniaturyzacja oraz wiążąca się z nią poprawa sprawności urządzeń optoelektronicznych.

Głównym celem serii publikacji [1-5] stanowiących osiągnięcie naukowe autora było twórcze zastosowanie i rozwinięcie metod mechaniki kontinuum użytych wraz z metodami numerycznymi do modelowania sprzężonych pól mechanicznych i elektrycznych w nanometrowych heterostrukturach półprzewodnikowych. W pracach [4,5] analizowano w pełni sprzężone zagadnienie brzegowe piezoelektryczności dla różnych morfologii kropek kwantowych GaN/AlN. Morfologia kropek kwantowych zmienia się wraz ze zmianą orientacji krystalograficznej tychże heterostruktur półprzewodnikowych i modyfikuje wartości i rozkłady sprężysto-elektrycznych pól sprzężonych. W pracach tych analizowano przyczyny znacząco lepszych parametrów optoelektronicznych struktur semipolarnych oraz niepolarnych w porównaniu ze strukturami polarnymi. Wpływ nieliniowości sprężystej i piezoelektrycznej na pola sprzężone w heterostrukturach kwantowych GaN/AlN był przedmiotem analizy w pracy [3]. Oszacowano wpływ powyższych nieliniowości na zmiany wartości szczytowych i rozkładów przestrzennych pól sprzężonych w kropkach kwantowych o różnej morfologii i orientacji krystalograficznej. W pracy [2] przedstawiono analizę oddziaływania prostoliniowej dyslokacji typu threading z izolowaną kropką kwantową GaN zanurzoną w matrycy AlN. Wzajemne sprzężenie elektromechaniczne w układzie kropka-dyslokacja zależy od charakteru dyslokacji i ma znacząco różny wpływ na właściwości optoelektroniczne heterostruktury. W pracy [1] przedstawiono rozważania teoretyczne dotyczące nieliniowego modelu piezoelektrycznego sformułowanego w oparciu o aparat matematyczny skończonych deformacji i opisano zmienność stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu w przypadku zmiany miary odkształcenia. Wyrowadzono ogólne i szczegółowe formuły przeliczające stałe piezoelektryczne w zależności od miary odkształcenia.

Szersze omówienie przeprowadzonych badań i zastosowanych metod badawczych przedstawiono poniżej.

### Wpływ morfologii na wbudowane w kropki kwantowe GaN/AlN piezoelektryczne pola sprzężone

Klasyczne urządzenia optoelektroniczne oparte na kryształach półprzewodnikowych Si czy typu III-V (np. GaAs, CdTe) mają wiele ograniczeń. Wśród nich najważniejszym wydaje się być ograniczenie wynikające z szerokości pasma zabronionego, które bezpośrednio wiąże się z długością fali świetlnej możliwej do uzyskania w przypadku rekombinacji promienistej nośników w heterostrukturach kwantowych. W nowoczesnych urządzeniach magazynujących dane, kolorowych wyświetlaczach czy energooszczędnych źródłach światła (ang. solid state lighting SSL) wymagane jest światło z zakresu koloru niebieskiego - UV. Nie bez znaczenia jest również odporność na wysokie temperatury oraz agresywność środowiska pracy. Wszystkie wymienione wymagania spełniają półprzewodniki typu III-N, czyli kryształy GaN, AlN, InN oraz ich podwójne i potrójne roztwory stałe. Kryształy te, z regulowaną w szerokim zakresie przerwą energetyczną w granicach od 0.78eV aż do 6.25eV, są obiecującymi półprzewodnikami do budowy urządzeń optoelektronicznych pracujących w zakresie fali niebieskiej i nadfioletu. Pierwsze urządzenia optoelektroniczne zbudowane na heterostrukturach półprzewodnikowych typu III-N wykorzystywały zjawisko rekombinacji promienistej w studniach kwantowych GaN/AlN. W przypadku azotków ograniczenia technologiczne powodują, że wyhodowane heterostruktury zawierają bardzo dużą liczbę defektów struktury krystalicznej, przeważnie dyslokacji. Jednakże, w przypadku studni kwantowych duża część rekombinacji par elektron-dziura zachodzi w rdzeniu dyslokacji i ma

charakter niepromienisty. Wprowadzenie układu samo-organizujących się kropek kwantowych GaN/AlN zamiast studni kwantowych w dużej mierze eliminuje problem lokalizacji nośników wokół linii dyslokacji, gdyż kropka kwantowa sama w sobie stanowi pułapkę dla nośników i preferowana rekombinacja zachodzi w obszarze kropki i ma charakter promienisty. Z drugiej jednak strony, podobnie jak w przypadku studni kwantowych, w związku z orientacją krystalograficzną i morfologią kropek kwantowych, hodowanych głównie na kierunku polarnym (orientacja [0001]), występują w ich obszarze silne pola elektryczne powodujące przesunięcie ku czerwieni generowanego promieniowania, co ma negatywny wpływ na osiągi urządzeń optoelektronicznych. W literaturze efekt ten opisany jest jako kwantowy efekt Starka (ang. quantum confined Stark effect QCSE; *Miller et al. (1984) Phys. Rev. Lett. 53*). Silne pole elektryczne, o natężeniu nawet 10 MV/cm, powstaje w wyniku addytywnego działania polaryzacji piezoelektrycznej i spontanicznej, które to są zjawiskami charakterystycznymi dla półprzewodników o heksagonalnej symetrii krystalicznej. Jednym ze sposobów ograniczenia natężenia pola elektrycznego wbudowanego w polarne kropki kwantowe było wykorzystanie kropek hodowanych na kierunkach odmiennych od polarnego, tj. orientacjach semipolarnych oraz niepolarnych. Zmiana orientacji krystalograficznej kropek, oprócz obietnicy redukcji natężenia pola elektrycznego głównie poprzez zmianę orientacji polaryzacji spontanicznej, pociąga za sobą również zmianę morfologii kropek (z sześciokątnych ściętych piramid na ścięte piramidy o podstawie kwadratowej, prostokątnej lub trapezoidalnej), wpływającej na właściwości heterostruktur. Dlatego też, dość intensywnie badano morfologię i związane z nią właściwości fizyczne semipolarnych oraz niepolarnych heterostruktur półprzewodnikowych. Artykuły [4,5] obejmują tematykę badań semipolarnych i niepolarnych kropek kwantowych GaN/AlN o wybranych morfologiach. Głównym celem tych prac jest wyjaśnienie fizycznych mechanizmów stojących za niższą niż w kropkach polarnych intensywnością natężenia pola elektrycznego wbudowanego w semipolarną i niepolarną kropkę kwantową. We wzmiankowanych pracach analizie poddano kropki kwantowe o orientacjach (11-22) oraz (11-20). W celu analizy zjawiska zaproponowano podejście obejmujące modelowanie kontynuálne wraz z metodą elementów skończonych (MES). Ponieważ głównym źródłem deformacji we wzmiankowanych heterostrukturach jest niedopasowanie sieciowe pomiędzy elementami heterostruktury, które wynosi 2.47-4.07% (w zależności od orientacji krystalograficznej), dlatego przyjęto formalizm małych deformacji jako wystarczający do opisu kinematyki opisywanej heterostruktury.

W artykule [4] analizie poddano semipolarną kropkę kwantową hodowaną na płaszczyźnie (11-22) o podstawie prostokątnej oraz kropkę niepolarną hodowaną na płaszczyźnie (11-20) o podstawie trapezoidalnej. Ich wymiary odpowiadały opisanym w literaturze typowym kropkom kwantowym na wskazanych orientacjach. Do analizy przyjęto model izolowanej kropki GaN otoczonej barierą z kryształu AlN, której rozmiary były kilka razy większe od rozmiarów samej kropki. Stosunek objętości kropki do bariery (ok. 1:1000) zapewniał odpowiednią izolację kropki od wpływu warunków brzegowych na jej relaksację sprężystą i wbudowane pola elektryczne. W oparciu o zaimplementowane wcześniej w pakiecie metody elementów skończonych FEAP (*R. Taylor (2003) Finite Element Analysis Program*) własne modele anizotropowego kryształu, oprogramowano model kryształu piezoelektrycznego i dołączono do pakietu jako *user element*. Zaproponowany model materiału piezoelektrycznego uwzględnia anizotropię właściwości fizycznych kryształu oraz polaryzację spontaniczną (poprzez dodatkowy człon w równaniach konstytutywnych). Zastosowana w modelu addytywna dekompozycja odkształceń sieci krystalicznej (ang. lattice strain) na część sprężystą i chemiczną pozwala uwzględnić niedopasowanie sieciowe składowych heterostruktury. Kropka i bariera zostały zdyskretyzowane elementami typu solid 3D8 w pełni odtwarzając geometrię heterostruktury i jej orientację krystalograficzną. Ze względu na raportowany w literaturze brak dyfuzji na interfejsie GaN/AlN przyjęto jego prosty - skokowy model. Na brzegu analizowanej próbki założono zerowe kinematyczne warunki brzegowe dla przemieszczeń oraz potencjału. Parametry materiałowe modelu piezoelektrycznego przyjęto w

oparciu o dane literaturowe (*Vurgaftman & Meyer (2003) J. Appl. Phys. 94*). Tak zdefiniowane zagadnienie brzegowe piezoelektryczności rozwiązano metodą elementów skończonych przy wykorzystaniu solvera bezpośredniego korzystającego z rozkładu Choleskiego. Na bazie wyników numerycznych określony został schemat relaksacji sprężystej kropki oraz zależność polaryzacji piezoelektrycznej i spontanicznej od orientacji krystalograficznej. Oszacowano różnice wynikające ze zmiany geometrii i orientacji krystalograficznej kropki. W efekcie analizy osiągnięto następujące wyniki:

- ogólny schemat relaksacji sprężystej kropki kwantowej jest podobny dla wszystkich kropek kwantowych, bez względu na orientację i geometrię; sprowadza się on do ograniczonej relaksacji w płaszczyźnie wzrostu kropki oraz pełnej relaksacji na kierunku wzrostu,
- w płaszczyźnie wzrostu odkształcenia sieciowe są niemal zerowe a odkształcenia sprężyste odpowiadają niedopasowaniu sieciowemu,
- na kierunku wzrostu kropki odkształcenia sieciowe mają w przybliżeniu wartość niedopasowania a odkształcenia sprężyste są równe zero,
- potencjał elektrostatyczny będący superpozycją polaryzacji piezoelektrycznej i spontanicznej zależy od deformacji heterostruktury oraz orientacji krystalograficznej kropki,
- składowa piezoelektryczna potencjału zależy od wysokości kropki kwantowej oraz w ograniczonym stopniu od orientacji krystalograficznej kropki,
- składowa spontaniczna potencjału zależy od wzajemnej orientacji osi jej działania [0001] względem ścian kropki,
- w przypadku kropek polarnych obie składowe polaryzacji sumują się a wynikowy potencjał elektrostatyczny generuje wysokie natężenie pola elektrycznego,
- w heterostrukturach semipolarnych (11-22) pola polaryzacji piezoelektrycznej i spontanicznej są względem siebie obrócone, a wynikowy potencjał elektrostatyczny ma zdecydowanie niższe wartości szczytowe,
- w kropkach niepolarnych (11-20) polaryzacje piezoelektryczna i spontaniczna znoszą się (skutek specyficznej orientacji osi kropki i sieci krystalograficznej) a wynikowy potencjał elektrostatyczny ma niewielkie wartości szczytowe (różnica pomiędzy wartościami szczytowymi wynosi 0.58V, w kropce semipolarnej 1.43V, referencyjna kropka polarna 1.64V),
- maksymalne natężenie pola elektrycznego w heterostrukturze semipolarnej (11-22) wynosi 3.4 MV/cm w porównaniu do 1.6 MV/cm dla kropki niepolarniej (dla referencyjnej kropki polarnej 7.2 MV/cm),
- szacunkowa analiza struktury pasmowej heterostruktur wskazuje na znaczące różnice w przewidywanej energii rekombinacji nośników; przybliżony model pasmowy z potencjałem elektrostatycznym przewiduje 12% i 5% redukcję energii pasmowej dla struktur odpowiednio semipolarnej i niepolarniej (dla kropki polarnej redukcja wynosi 45%).

W pracy [5] dokonano analizy porównawczej różnych typów kropek kwantowych GaN/AlN obserwowanych w semipolarnych (11-22) warstwach epitaksjalnych. Okazuje się, że oprócz kropek kwantowych typowych dla tej orientacji krystalograficznej (jedna z analizowanych kropek w pracy [4]) występują niezamierzone typy kropek kwantowych o odmiennej orientacji i geometrii. Wydaje się, że warunki wzrostu podczas hodowli są na tyle korzystne dla samoorganizacji się kropek kwantowych, że oprócz typowych kropek o podstawie kwadratowej, prostokątnej czy trapezowej obecnych w płaszczyźnie wzrostu struktury (11-22), można również zaobserwować kropki na płaszczyźnie (10-11). Kropki te mają wyraźnie wydłużony, wrzecionowaty kształt z przekątnymi podstawy na kierunkach [-12-10] oraz [-1012]. Celem wyznaczenia rozkładów piezoelektrycznych pól sprężonych w kropkach kwantowych GaN/AlN o takiej morfologii i porównanie ich z typowymi semipolarnymi kropkami kwantowymi (11-22) wykonano numeryczną analizę porów-

nawczą trzech następująco zdefiniowanych kropek w postaci ściętych piramid: kropki o podstawie prostokątnej, kropki trapezowej (obie (11-22)) oraz kropki romboidalnej w płaszczyźnie (10-11). Przyjęto reprezentatywne dla danej orientacji krystalograficznej rozmiary kropek, a jako że obliczenia dotyczą izolowanej kropki do jej wymiarów dostosowano rozmiary bariery AlN. Na brzegu próbki przyjęto zerowe kinematyczne warunki brzegowe dla przemieszczeń i dla potencjału elektrostatycznego. Podobnie jak w przypadku pracy [4], jako model materiału przyjęto liniowy model materiału piezoelektrycznego z polaryzacją spontaniczną i addytywną dekompozycją odkształceń sprężystych i chemicznych. Geometrię kropki opisano elementami skończonych 3D8 typu solid, a następnie tak sformułowane zagadnienie brzegowe piezoelektryczności rozwiązano numerycznie metodą elementów skończonych przy pomocy pakietu obliczeniowego FEAP z piezoelektrycznym elementem użytkownika. W efekcie analizy osiągnięto następujące wyniki:

- dla romboidalnej kropki na płaszczyźnie (10-11), obserwowana jest wyraźna asymetria pomiędzy lateralnymi odkształceniami  $\epsilon_{xx}$  i  $\epsilon_{yy}$  (wynika z geometrii kropki),
- odmienna orientacja krystalograficzna kropki romboidalnej (10-11) powoduje znaczące zmiany w rozkładzie przestrzennym potencjału (znacząca redukcja składowej polaryzacji spontanicznej); różnica wartości szczytowych potencjału wynosi 1.76V (w porównaniu do 2.09V i 2.88V dla kropek (11-22)),
- oszacowanie energii rekombinacji kropki kwantowej sugeruje najwyższe wartości dla kropki romboidalnej,

W pracach [4,5] obejmujących zagadnienia brzegowe liniowej piezoelektryczności dla półprzewodnikowych heterostruktur kwantowych GaN/AlN analizowano rozkłady i wartości szczytowe piezoelektrycznych pól sprzężonych. W tym celu sformułowano i rozwiązano numerycznie zagadnienie brzegowe. W przeciwieństwie do innych badań kropek kwantowych publikowanych w literaturze analizowane w pracach [4,5] zagadnienie obejmuje pełne sprzężenie piezoelektryczne z polaryzacją spontaniczną a także pełną anizotropię właściwości sprężystych, elektrycznych i piezoelektrycznych. Wykorzystanie metody elementów skończonych pozwala w pełni odwzorować geometrię kropki i jej orientację krystalograficzną. W przypadku wielu publikowanych w literaturze badań dotyczących heterostruktur piezoelektrycznych powszechnym było stosowanie uproszczonego podejścia do zagadnienia poprzez ograniczenie się do zagadnienia tzw. semi-sprężonego (sprężenie jednokierunkowe mechaniczno-elektryczne), czy też założenia dotyczące ograniczenia relaksacji sprężystej kropki w otaczającej barierze. Innym powszechnym zabiegiem upraszczającym zagadnienie było stosowane założenie izotropii sprężystej i piezoelektrycznej kryształu. W wielu przypadkach wprowadzone uproszczenia pozwalały na rozwiązanie zagadnienia w sposób analityczny, lecz uzyskane w ten sposób rozwiązania nawet dla prostej morfologii kropki dalekie są od rzeczywistości. W stosunku do istniejących prac teoretycznych, zaproponowane przeze mnie podejście obejmujące w pełni sprzężoną anizotropową piezoelektryczność z geometrią kropki odwzorowaną poprzez elementy skończone pozwala uwzględnić:

- dowolną geometrię kropki kwantowej opisaną za pomocą elementów skończonych,
- anizotropię właściwości sprężystych i piezoelektrycznych kryształów typu III-N o symetrii heksagonalnej,
- relaksację sprężystą będącą efektem niedopasowania sieciowego kropki zgodnie z jej orientacją krystalograficzną,
- polaryzację spontaniczną uwzględniającą orientację płaszczyzn ścian kropki względem osi [0001].

Oba artykuły powstały w ramach grantu NCN N N519 647640 (*Modelowanie naprężeń i pól sprzężonych w półprzewodnikach*) i stanowią logiczną kontynuację wcześniejszych publikacji autora w temacie modelowania piezoelektrycznych heterostruktur półprzewodnikowych. Koncepcja artykułu [4], implementacja modelu teoretycznego, obliczenia numeryczne oraz większa część

analizy wyników i prac edycyjnych nad manuskrytem jest mojego autorstwa. Artykuł [5] powstał jako efekt współpracy pomiędzy IPPT PAN a Uniwersytetem Arystotelesa w Salonikach datującej się od czasu projektu europejskiego PARSEM. Byłem autorem wstępnej koncepcji artykułu oraz obliczeń numerycznych. W trakcie prac nad manuskrytem, we współpracy z dr. Toby Youngiem (IPPT PAN), praca z czysto teoretycznej ewoluowała do obecnej formy obejmującej również badania eksperymentalne przeprowadzone przez prof. Komninou, prof. Dimitrakopulosa i dr Lotsari (Uniwersytet Arystotelesa, Grecja). W tym przypadku byłem współautorem interpretacji wyników oraz uczestniczyłem w pracach edycyjnych nad manuskrytem tego artykułu.

### Analiza nieliniowości zjawiska piezoelektrycznego

Odstępstwo od liniowego charakteru zjawiska piezoelektrycznego, w szczególnych przypadkach obciążenia, jak np. duże deformacje, wysokie natężenie pola elektrycznego może powodować odmienne od założonego (liniowego) zachowanie się heterostruktur półprzewodnikowych. Dla heterostruktur azotkowych typu III-N nie brakuje w literaturze doniesień eksperymentalnych opisujących nieliniową odpowiedź materiału, jak i badań teoretycznych potwierdzających nieliniowe właściwości azotków oraz wyznaczających wartości stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu. Oprócz tego, dość popularne w literaturze jest podejście opisujące nieliniowość efektu piezoelektrycznego w formie poprawek w funkcji ciśnienia. Pomimo, że niepoprawne z punktu widzenia teorii równań konstytutywnych, podejście takie sprawdza się w przybliżonych obliczeniach zjawiska piezoelektrycznego. Dodatkowo, model taki łatwo podlega eksperymentalnej weryfikacji, np. poprzez pomiary heterostruktury obciążonej w kowadlcie diamentowym. Z punktu widzenia termodynamiki i teorii równań konstytutywnych, stałe piezoelektryczne wyższego rzędu są trzecią i kolejnymi pochodnymi odpowiedniego potencjału termodynamicznego po odkształceniu i natężeniu pola elektrycznego. Analiza teoretycznych wartości termodynamicznie poprawnych stałych piezoelektrycznych wyższego rzędu dla półprzewodnikowych kryształów typu III-N o symetrii heksagonalnej jest na chwilę obecną jeszcze dość problematyczna, głównie ze względu na problemy aplikacyjne teorii funkcjonału gęstości (ang. DFT) do wyznaczenia energii heterostruktury i jej pochodnych. Dlatego, część doniesień literaturowych stanowią fragmentaryczne dane, nie obejmujące pełnego zestawu stałych piezoelektrycznych. Jedną ze stosunkowo nowych prac prezentujących kompletne i termodynamicznie poprawne wartości stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu\* jest praca Prodhomme et al. [*Prodhomme et al. (2013) Phys. Rev. B 88*]. W pracy [3] przeanalizowano wpływ nieliniowości zjawiska sprężystego i piezoelektrycznego na wartości i rozkład pól odkształcenia/naprężenia oraz potencjału elektrostatycznego/pola elektrycznego w różnych typach kropek kwantowych GaN/AlN. W tym celu sformułowano zagadnienie brzegowe dedykowane nieliniowej piezoelektryczności. Równania konstytutywne uzupełniono o odpowiednie człony nieliniowe, których wprowadzenie wiąże się z formalizmem matematycznym skończonych deformacji. W takim przypadku analiza kinematyki heterostruktury wymaga zastosowania multiplikatywnej dekompozycji gradientu deformacji (w tym przypadku na część sprężystą i chemiczną). Kinematyka próbki opisana jest za pomocą lagranżowskich tensorów odkształcenia (miara Biota) i natężenia pola. Na bazie opisanych w literaturze badań mikroskopowych HRTEM struktur kwantowych GaN/AlN, założono typową morfologię piramidalnych kropek hodowanych na kierunku polarnym, semipolarnym i niepolarnym. Geometria kropek (polarna - o podstawie sześciokąta, semipolarna - o podstawie prostokąta, oraz niepolarna - o podstawie trapezu) została odwzorowana za pomocą elementów prostopadłościennych typu solid 3D. Przyjęcie do analizy izolowanej kropki kwantowej GaN wymaga założenia stosunkowo dużych rozmiarów bariery AlN,

---

\* przez analogię do magnetostrykcji stałe piezoelektryczne, ze względu na sposób różniczkowania energii, dzieli się w literaturze na stałe elastostrykcji oraz elektrostrykcji.

co daje w efekcie stosunek objętości kropki do bariery na poziomie 1:1000. Tak przyjęte rozmiary próbki uzasadniają zastosowanie zerowych kinematycznych warunków brzegowych dla przemieszczeń i potencjału elektrostatycznego na powierzchni próbki. Zagadnienie brzegowe nieliniowej piezoelektryczności dla izolowanej kropki GaN zanurzonej w barierze AlN rozwiązano za pomocą metody elementów skończonych i dedykowanego elementu użytkownika zaimplementowanego do pakietu obliczeniowego FEAP. W celu określenia wpływu fizycznej nieliniowości materiału przeprowadzono dwie serie obliczeń. Pierwsza seria ze stałymi wyższego rzędu równymi zero a druga z niezerowymi stałymi wyższego rzędu. Analiza wyników obliczeń wykazała, że:

- wpływ nieliniowości na wartości szczytowe i rozkład pola odkształceń i naprężeń jest pomijalnie mały dla kropek kwantowych GaN/AlN,
- wpływ nieliniowości na wartości i rozkład potencjału elektrostatycznego oraz natężenie pola elektrycznego są znaczące jedynie w kropkach hodowanych na kierunkach odmiennych od polarnego,
- dla heterostruktur semipolarnych i niepolarnych zmiana potencjału elektrostatycznego wywołana nieliniowością fizyczną materiału wynosi około 8%, a zmiana natężenia pola elektrycznego osiąga 13%.

Odształcenia sieciowe heterostruktur kwantowych GaN/AlN mają swoje główne źródło w niedopasowaniu sieciowym, które we wzmiankowanych próbkach ma wartość od 2.47-4.07%. Odształcenia takie są zbyt małe aby ujawnić wpływ nieliniowości i zauważalnie wpłynąć na otrzymane wyniki. W przypadku potencjału elektrostatycznego wpływ nieliniowości mocno zależy od orientacji heterostruktury. Dla struktury polarnej addytywne działanie polaryzacji piezoelektrycznej i spontanicznej powoduje, że zmiana potencjału piezoelektrycznego wywołana nieliniowością, ma stosunkowo niewielki wpływ na końcowe wyniki. W heterostrukturach semipolarnych i niepolarnych, gdzie polaryzacja piezoelektryczna i spontaniczna częściowo lub nawet całkowicie się znoszą sytuacja jest zgoła odmienna. W tym przypadku, zmiany polaryzacji piezoelektrycznej odnoszone są do stosunkowo małych wartości całkowitego potencjału elektrostatycznego. Obserwowany wpływ nieliniowości rzędu 10% dowodzi, że nieliniowa piezoelektryczność może ujawniać się i odgrywać istotną rolę w przypadku odmiennej morfologii heterostruktury czy też skrajnych warunkach pracy/obciążenia. Dostępne aktualnie w literaturze prace dotyczące nieliniowej piezoelektryczności obejmujące swoim zakresem zwykle bardzo ograniczony zakres nieliniowości. Zwykle jest to nieliniowość sprężysta lub piezoelektryczna, traktowane osobno. W obu przypadkach mamy do czynienia z nieliniowością typu fizycznego, bez jakichkolwiek odniesień do nieliniowości geometrycznej wynikającej z formalizmu skończonych deformacji. Z rzadka wprowadzana jest do analizy skończona miara odkształcenia, zwykle jest to odkształcenie Greena. Biorąc ten fakt pod uwagę, tematyka pracy [3], modelowanie numeryczne obejmujące nieliniowe zagadnienie i przedstawiona dyskusja wyników numerycznych stanowią istotny krok naprzód w dziedzinie modelowania nieliniowego heterostruktur piezoelektrycznych. Zaproponowane podejście, wedle wiedzy autora stanowi pierwsze tak komplementarne podejście obliczeniowe do tematu nieliniowości piezoelektrycznej z uwzględnieniem nieliniowości geometrycznej i fizycznej. Nieliniowość geometryczna ma tu o tyle istotne znaczenie, że świadomość skutków które niesie z sobą przyjęcie formalizmu skończonych deformacji jest bardzo ograniczona. Zaproponowane podejście charakteryzuje się:

- wykorzystaniem matematycznego aparatu skończonych deformacji, wraz z użyciem lagranżowskich tensorów odkształcenia i natężenia pola elektrycznego,
- sformułowaniem, konsystentnych termodynamicznie, nieliniowych równań konstytutywnych dla piezoelektryczności,
- jednoczesnym uwzględnieniem nieliniowości sprężystej i piezoelektrycznej (elastostrykcji).

Pomysł na artykuł [3] powstał po lekturze pracy Prodhomme et al. na temat nieliniowej piezoelektryczności. Koncepcja artykułu następnie ewoluowała w trakcie dyskusji z prof. Dłużewskim i dr. Toby Youngiem. Model teoretyczny nieliniowej piezoelektryczności opracowałem



na podstawie opublikowanych wcześniej we współpracy z prof. Dłużewskim prac na temat nieliniowej sprężystości i piezoelektryczności. Ostateczna koncepcja artykułu, obliczenia numeryczne, dyskusja wyników oraz większość prac edycyjnych nad manuskrypcem są mojego autorstwa.

### Modelowanie piezoelektrycznych pól sprzężonych w układzie kropka kwantowa - dyslokacja

Wzajemne oddziaływanie mechaniczne i elektryczne w układzie kropka kwantowa i zakotwiczona na jej krawędzi dyslokacja (krawędziowa, śrubowa lub mieszana) jest przedmiotem intensywnych badań teoretycznych i eksperymentalnych. W literaturze można znaleźć analizy, które wyjaśniają wpływ dyslokacji krawędziowej na proces zarodkowania i wzrostu kropek. W tym przypadku istotne wydają się być lokalne odkształcenia sieci krystalicznej wokół rdzenia dyslokacji, które modyfikują stałą sieciową podłoża i ułatwiają wzrost heterostruktury a później odpowiedzialne są za jej częściową relaksację sprężystą. Podejście takie uwzględnia jedynie oddziaływanie mechaniczne ale wystarcza aby wyjaśnić niektóre aspekty wzajemnego sprzężenia. Jednakże, dla pełnego zrozumienia zjawiska wydaje się istotnym aby uwzględnić również oddziaływanie elektryczne pomiędzy polem elektrycznym wbudowanym w kropkę a ładunkiem elektrycznym zgromadzonym wzdłuż linii dyslokacji. Artykuł [2] podejmuje temat oddziaływania kropka-dyslokacja i analizuje pełne zagadnienie wzajemnego oddziaływania pól sprzężonych wbudowanych w polarną kropkę kwantową GaN/AlN z polami sprzężonymi wokół dyslokacji przebiegającej warstwy heterostruktury. Na podstawie badań eksperymentalnych techniką holografii elektronowej (jedna z technik mikroskopii elektronowej) oszacowano ładunek elektryczny związany z rdzeniem dyslokacji na  $0.3-1.0e/c$  (elektron na stałą sieciową  $c$ ). Gęstość liniowa ładunku wzdłuż linii dyslokacyjnej zależy do rodzaju dyslokacji i jest najmniejsza dla dyslokacji krawędziowej a największa w przypadku dyslokacji śrubowej. Do analizy zagadnienia przyjęto typową morfologię polarnej kropki kwantowej (ścięta piramida o podstawie sześciokąta) i wektory Burgersa dyslokacji dla heksagonalnych kryształów GaN opisane w literaturze. W celu analizy zmian w rozkładach i wartościach pól sprzężonych wbudowanych w kropkę z uwzględnieniem dodatkowego oddziaływania elektrycznego dyslokacji przeprowadzono serię obliczeń dla kropek polarnych o różnej wysokości z zakotwiczoną na krawędzi podstawy dyslokacją krawędziową lub śrubową. W artykule [2] prostoliniowa dyslokacja typu threading przebiegająca warstwy heterostruktury GaN/AlN jest źródłem zarówno pola odkształceń jak również pola elektrycznego generowanego przez ładunek elektryczny elektronów zlokalizowanych wokół zaburzonych wiązań atomowych w rdzeniu dyslokacji. Pola sprężyste i elektryczne związane z dyslokacją i kropką kwantową oddziałują wzajemnie na siebie, lokalnie wzmacniając się lub osłabiając. W celu analizy zjawiska sformułowano zagadnienie brzegowe nieliniowej piezoelektryczności i rozwiązano je za pomocą metody elementów skończonych. W ramach modelowania kontynualnego przyjęto formalizm skończonych deformacji a model dyslokacji opisany został za pomocą dystorsji sieci (wzory Love'a, *Hirth & Lothe (1982) Theory of Dislocations*). Podobnie jak w przypadku nieliniowego modelowania pól sprzężonych w kropkach kwantowych w pracy [3], przyjęto multiplikatywną dekompozycję gradientu deformacji na część sprężystą, chemiczną i plastyczną (związaną z trwałą reorganizacją struktury atomowej w rdzeniu dyslokacji). Zewnętrzny ładunek elektryczny związany z rdzeniem dyslokacji, modyfikuje równanie równowagi pola elektrycznego. Skończone rozmiary próbki w obecności naładowanej elektrycznie dyslokacji przebiegającej jej brzeg powodują konieczność zastosowania kompromisu w przypadku warunków brzegowych. Zerowe, kinematyczne warunki brzegowe dla przemieszczeń i potencjału zastosowano jedynie na części powierzchni próbki, podczas gdy pozostała część powierzchni (w otoczeniu linii dyslokacji) pozostawiono jako swobodne. Model teoretyczny kryształu piezoelektrycznego z defektami zaimplementowano w pakiecie metody elementów skończonych FEAP w postaci elementu użytkownika. W ramach

analizy problemu otrzymano następujące wyniki:

- obecność dyslokacji położonej przy krawędzi podstawy kropki powoduje zaburzenie osiowej symetrii potencjału elektrostatycznego i odkształceń sprężystych wbudowanych w kropkę,
- niewielki skuteczny zasięg oddziaływania pól odkształceń i pola elektrycznego związanego z dyslokacją powoduje ograniczenie ich wpływu do części kropki najbliższej dyslokacji,
- osiowo symetryczne pole elektrostatyczne generowane przez dyslokację powoduje w obszarach swojego działania znaczące przesunięcie ku ujemnym wartościom potencjału wbudowanego w kropkę kwantową; wyższa gęstość ładunku elektrycznego dla dyslokacji śrubowej generuje silniejsze przesunięcie,
- obecność zewnętrznego pola elektrycznego związanego z dyslokacją obniża osiągi heterostruktury,
- lokalne pole odkształceń wokół dyslokacji krawędziowej poprzez relaksację naprężeń jest w stanie częściowo skompensować negatywny wpływ pola elektrycznego od dyslokacji.

Otrzymane wyniki są zgodne z wynikami badań eksperymentalnymi sugerującymi zdecydowanie negatywny wpływ dyslokacji śrubowych na optoelektroniczne parametry kropek kwantowych, podczas gdy dyslokacje krawędziowe są pod tym względem neutralne. Zaproponowane w pracy [2] nowatorskie podejście do zagadnienia wzajemnych oddziaływań w układzie kropka-dyslokacja, po raz pierwszy uwzględniające ładunek elektryczny rdzenia dyslokacji oprócz tego obejmuje:

- opis kinematyki zdefektowanego kryształu w ramach skończonych deformacji,
- multiplikatywną dekompozycję deformacji kryształu na część sprężystą, chemiczną i plastyczną,
- nieliniowość geometryczną ze względu na przyjęty formalizm skończonych deformacji.

Model teoretyczny zagadnienia powstał we współpracy z prof. Dłużewskim, jednakże koncepcja artykułu, implementacja numeryczna modelu nieliniowego kryształu piezoelektrycznego z defektami, obliczenia numeryczne, dyskusja wyników oraz większa część prac edycyjnych nad manuskryptem są mojego autorstwa.

### Zmienność stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu przy zmianie miary odkształcenia

W literaturze dotyczącej badań nad półprzewodnikowymi heterostrukturami piezoelektrycznymi można znaleźć wiele doniesień na temat mniej lub bardziej istotnych odstępstw od liniowego zachowania się kryształów. Dotyczy to zarówno badań eksperymentalnych, jak i kwantowo-mechanicznego modelowania teoretycznego. W przypadku teoretycznego wyznaczania wartości stałych piezoelektrycznych powszechna jest metodologia oparta na teorii funkcjonału gęstości, gdzie stałe piezoelektryczne drugiego rzędu oblicza się różniczkując energię zdeformowanej struktury względem pola elektrycznego i odkształcenia. Jeśli stałe piezoelektryczne zależą od odkształcenia, a badany proces obejmuje duże deformacje, to dla wyników nie jest obojętne jaką miarę odkształcenia przyjmujemy do analizy. W mechanice ciał odkształcalnych temat miar odkształcenia jest dobrze poznany i opisany. Można zdefiniować wiele równoważnych i wzajemnie przeliczalnych miar odkształcenia i skoniugowanych z nimi miar naprężenia, np. rodzina miar Setha-Hilla, (*B. Seth (1964) in Reiner & Abir, Second-Order Effects in Elasticity, Plasticity and Fluid Dynamics; R. Hill (1970) Proc. R. Soc. London A*). W literaturze dotyczącej sprężystości można znaleźć teoretyczne rozważania opisujące zależność stałych sprężystych trzeciego rzędu\* od miary odkształcenia (np. *Dłużewski (2000) J. Elast. 60*). Udowodniłem, że analogicznie jak w przypadku stałych sprężystości, podobna zależność od miary odkształcenia istnieje dla stałych

---

\* ogólnie przyjęta konwencja nazewnictwa przewiduje, że liniowe współczynniki sprężystości noszą nazwę stałych drugiego rzędu, stałe nieliniowe są stałymi trzeciego rzędu, zob. np. *Brugger (1964) Phys. Rev. 133*

piezoelektrycznych drugiego rzędu. Opisany w pracy [1] efekt zmienności stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu wynika z przyjęcia formalizmu skończonych deformacji i założonego związku pomiędzy deformacją ciała a odkształceniem. Różniczkowanie energii zdeformowanej heterostruktury (deformacja w otoczeniu stanu naturalnego) względem różnych odkształceń daje w efekcie różne wartości stałych piezoelektrycznych wyższego rzędu. W pracy [1] wyprowadzony jest ogólny wzór transformacyjny umożliwiające zamianę stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu na inne w ramach rodziny miar odkształcenia Setha-Hilla. W przypadku powszechnie spotykanych w zastosowaniach praktycznych kryształów z grup krystalograficznych  $\bar{4}3m$  (symetria kubiczna) oraz  $6mm$  (symetria heksagonalna) wyprowadzone zostały również szczegółowe wzory transformacyjne dla każdej z niezależnych stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu. W oparciu o te wzory wyznaczono wartości liczbowe niezależnych stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu dla GaAs i GaN, przyjętych jako przykłady kryształów o symetrii  $\bar{4}3m$  i  $6mm$ . Część ze stałych piezoelektrycznych przy zmianie miary odkształcenia pozostaje niezmienna. Dla odmiany, niektóre stałe mogą się różnić nawet o 20% (zmiana miary odkształcenia Biota na odkształcenie Hencky'ego:  $m=1 \rightarrow 0$  oraz Greena:  $m=1 \rightarrow 2$ ). Ujawniona zmienność stałych piezoelektrycznych wyższego rzędu wymaga w ramach analizy zagadnienia brzegowego nieliniowej piezoelektryczności zachowania kompatybilności pomiędzy stosowanym modelem teoretycznym a przyjętymi do obliczeń danymi liczbowymi. W przeciwnym wypadku już na wstępie obliczenia obarczone będą błędem systematycznym prowadzącym do błędnych wyników.

Praca [1] analizuje efekt związany ze zmianą miary odkształcenia w zagadnieniu nieliniowej piezoelektryczności. Efekt ten związany jest z przyjętym formalizmem skończonych deformacji i ma charakter geometrycznej nieliniowości. Do tej pory, efekt ten był pomijany w literaturze nieliniowej piezoelektryczności. W oparciu o formalizm skończonych deformacji i związanych z tym lagranżowskich tensorów odkształcenia (miary Setha-Hilla) oraz dzięki sformułowaniu poprawnych termodynamicznie formuł stałych piezoelektrycznych wyższego rzędu jako pochodnych potencjału po odpowiednich zmiennych termodynamicznych, uzyskano:

- ogólny wzór transformacyjny umożliwiający przeliczenie stałych piezoelektrycznych dla różnych miar odkształcenia,
- wyprowadzono szczegółowe wzory transformacyjne stałych piezoelektrycznych przy zmianie miary odkształcenia dla wybranych grup symetrii kryształów ( $\bar{4}3m$  i  $6mm$ ).

Artykuł jest całkowicie samodzielną pracą od etapu koncepcji poprzez edycję manuskryptu aż do publikacji.

## Podsumowanie

Rezultaty otrzymane w ramach cyklu tematycznie powiązanych ze sobą publikacji [1-5] przybliżają nas do pełniejszego zrozumienia zjawiska piezoelektrycznego w półprzewodnikowych heterostrukturach kwantowych na poziomie nanoskali oraz charakteru jego nieliniowości. W ramach prezentowanych prac otrzymano następujące oryginalne rezultaty:

- sformułowano zagadnienie brzegowe anizotropowej piezoelektryczności i rozwiązano je numeryczne metodą elementów skończonych dla dowolnej geometrii i orientacji krystalograficznej heterostruktury, umożliwia to analizę relaksacji sprężystej, polaryzacji piezoelektrycznej i spontanicznej, oraz ilościową i jakościową ocenę pól sprzężonych wbudowanych w tego typu heterostruktury kwantowe [4,5],
- ujawniono mechanizm redukcji pola elektrycznego wbudowanego w heterostruktury kwantowe hodowane na kierunkach odmiennych od polarnego [4,5],
- w oparciu o formalizm skończonych deformacji sformułowano oryginalny model nieliniowej piezoelektryczności pozwalający na ocenę jego wpływu nieliniowości na rozkłady i wartości pól sprzężonych wbudowanych w półprzewodnikowe heterostruktury kwantowe o

- różnych orientacjach krystalograficznych [3],
- dokonano oceny istotności nieliniowości zjawiska piezoelektrycznego w przypadku heterostruktur kwantowych hodowanych na różnych orientacjach krystalograficznych [3],
  - dokonano jakościowej i ilościowej oceny wpływu dyslokacji na osiągi kropek kwantowych GaN/AlN w oparciu o zmodyfikowany model oddziaływania mechaniczno-elektrycznego pomiędzy kropką kwantową i naładowaną elektrycznie dyslokacją przebijającą struktury epitaksjalne [2],
  - opisano mechanizm oddziaływania dyslokacji krawędziowej i śrubowej na kropkę kwantową GaN/AlN [2],
  - wyprowadzono ogólne i szczegółowe formuły transformacyjne umożliwiające przeliczenie stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu przy zmianie miary odkształcenia [1],
  - przeliczono wartości stałych piezoelektrycznych drugiego rzędu dla kryształów GaN (6mm) oraz GaAs (43m) dla różnych miar odkształcenia w ramach rodziny miar Setha-Hilla [1].

Przedstawione w niniejszym autoreferacie omówienie celu i osiągniętych wyników w cyklu publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe obejmuje samoocenę mojej wkładu i określenie najważniejszych osiągnięć w zakresie mechaniki kontinuum i modelowania numerycznego metodą elementów skończonych. Główny obszar mojej aktywności naukowej zorientowany był na zagadnienia numerycznego modelowania zjawiska piezoelektrycznego w półprzewodnikowych heterostrukturach kwantowych. Cykl publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe obejmuje publikacje w czasopiśmie JCR i w znaczącej części przedstawiają wyniki moich własnych badań.

## 5. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo - badawczych.

Sprężysta relaksacja półprzewodnikowych heterostruktur krystalicznych oraz modelowanie naprężeń rezydualnych panujących w tychże heterostrukturach było przedmiotem moich intensywnych badań. Moje zainteresowania skupiały się na numerycznym modelowaniu anizotropowej sprężystości kryształów i sprężysto-plastycznym zachowaniu się epitaksjalnych struktur krystalicznych z defektami sieci. Dystrybucja skład chemicznego oraz dystorsje sieci związane z obecnością defektów sieci wyznaczone były na podstawie badań eksperymentalnych za pomocą mikroskopii elektronowej (TEM). Obecność dyslokacji niedopasowania na interfejsie heterostruktury oraz dyslokacji typu threading przebijających warstwy kryształu wraz z ich wpływem na naprężenia rezydualne były przedmiotem analizy. Obecność dyslokacji, które są źródłem dużych deformacji struktury wymusza stosowanie formalizmu skończonych deformacji w celu poprawnego opisu kinematyki zdeformowanej heterostruktury. Problem brzegowy sformułowany w oparciu o dane uzyskane w trakcie pomiarów mikroskopowych rozwiązywany był numerycznie metodą elementów skończonych a otrzymane pola odkształceń i naprężeń opisywały stan panujący w heterostrukturze z defektami. Kilka artykułów analizujących opisana problematykę powstało w ramach wieloletniej współpracy z Instytutem Fizyki PAN oraz ENSICAEN we Francji. Oprócz tego, proces relaksacji sprężystej cienkich heterostruktur półprzewodnikowych oraz jej wpływ na obserwowany pod mikroskopem elektronowym obraz wysokiej rozdzielczości (HRTEM) był przedmiotem analizy. Konieczność zmniejszenia grubości próbki do 5-20nm (w przypadku obrazów HRTEM) wiąże się z częściową relaksacją sprężystą cienkiej warstwy kryształu co modyfikuje początkowy stan odkształcenia/naprężenia w heterostrukturze. Obserwowana pod mikroskopem cienka struktura krystaliczna zdecydowanie odbiega od oryginalnej próbki, o zdecydowanie objętościowym charakterze. Stąd, relaksacja sprężysta materiału zachodząca na skutek procesu przygotowywania próbek mikroskopowych jest jednym z istotnych czynników modyfikujących stan badanej próbki oraz wpływających na jakość i dokładność obserwacji mikroskopowych. Modelowanie numerycz-

ne, które jest w stanie odtworzyć początkowy stan heterostruktury znacząco wspomaga i poprawia dokładność badań mikroskopowych. Komputerowa rekonstrukcja obrazu mikroskopowego na podstawie wyników modelowania numerycznego umożliwia porównanie obrazów eksperymentalnych i symulowanych oraz ocenę stopnia relaksacji próbki wraz z jego wpływem na stan naprężeń rezydualnych w próbce. Do artykułów obejmujących tę tematykę można zaliczyć prace wyszczególnione w wykazie dorobku autora II.A.1,3,4,8,9,10 oraz II.E.1,2,3,5,7,8,9,10,11,13. W przypadku tych prac zajmowałem się modelowaniem numerycznym, przy użyciu osobiście oprogramowanych sprężystych i sprężysto-plastycznych elementów skończonych w ramach pakietu obliczeniowego FEAP. Współuczestniczyłem również przy dyskusji wyników oraz w pracach edycyjnych przy tworzeniu manuskryptów. W przypadku pracy proponującej nowe, iteracyjne podejście do wyznaczania konfiguracji atomowych zdefektowanych struktur i jej energii (II.A.1) byłem autorem obliczeń porównawczych energii rdzenia dyslokacji dla różnych typów dyslokacji i różnych wektorów Burgersa.

Innym szeroko analizowanym zagadnieniem w ramach aktywności naukowej autora, realizowanego m.in. we współpracy z IWC PAN, jest modelowanie numeryczne metodą elementów skończonych piezoelektrycznych heterostruktur kwantowych oraz modelowanie nieliniowości ich zachowania obserwowanej eksperymentalnie. Analiza dotyczyła zarówno nieliniowości sprężystej jak i piezoelektrycznej. Analiza piezoelektrycznych heterostruktur kwantowych dotyczyła izolowanych kropek kwantowych GaN/AlN jako i ich układów przestrzennych oraz miała na celu wyznaczenie wartości szczytowych i rozkładów przestrzennych pól odkształceń i potencjału elektrostacyjnego. W oparciu o te dane, szacowano właściwości optoelektroniczne heterostruktur. Badania efektów nieliniowych, oparte o modelowanie kontynualne wsparte metodą elementów skończonych, obejmowały m.in. zagadnienie wpływu nieliniowości sprężystej na strukturę krystaliczną zdefektowanych heterostruktur półprzewodnikowych. W tym przypadku duże deformacje sieci krystalicznej związane z jej przebudową/zaburzeniem w rdzeniu dyslokacji i jego bliskim otoczeniu powodują istotne i rejestrowane eksperymentalnie (np. obrazy HRTEM) odstępstwa od liniowego zachowania się materiału. W przypadku nieliniowości piezoelektrycznej modelowano numerycznie obserwowane eksperymentalnie odstępstwo od liniowego modelu zachowania się heterostruktur kwantowych oraz jego wpływ na strukturę pasmową. Innym zagadnieniem związanym z badaniem efektów nieliniowych było wyznaczenie wartości liczbowych nieliniowych współczynników sztywności dla półprzewodnikowych kryształów typu III-N. Do grupy prac zajmujących się opisywaną tematyką badań można zaliczyć prace II.A.5,6,7 oraz II.E.5,6. W ramach współpracy przy tworzeniu tych prac byłem autorem obliczeń numerycznych oraz współuczestniczyłem w analizie danych i pracach edycyjnych przy manuskryptach prac.

