

Załącznik 3

Grzegorz Maciejewski

**Instytut Podstawowych Problemów Techniki
Polska Akademia Nauk**

Autoreferat

Warszawa 2012



Spis treści

1	Osiągnięcia naukowo-badawcze	1
1.1	Wykaz recenzowanych prac naukowych	1
1.1.1	Prace opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora	1
1.1.2	Prace opublikowane przed uzyskaniem stopnia doktora	3
1.2	Wykaz nierecenzowanych prac naukowych	4
1.2.1	Prace opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora	4
1.2.2	Prace opublikowane przed uzyskaniem stopnia doktora	5
1.3	Wykaz prac stanowiących jednotematyczny cykl publikacji	6
1.4	Omówienie celu naukowego powyższych prac, osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania	7
1.4.1	Deformacje zdefektowanych warstw krystalicznych - [H3]	8
1.4.2	Analiza deformacji sieci krystalicznych wywołanych przez defekty - [H1,H2,H4]	10
1.4.3	Deformacje (prawie) bezdefektowych warstw krystalicznych - [H5,H6]	12
1.4.4	Podsumowanie - najważniejsze osiągnięcia przeprowadzonych badań	15
1.5	Sumaryczny impact factor publikacji naukowych według listy Journal Citation Report (JCR).	16
1.6	Liczba cytowań publikacji i index Hirscha według bazy Web of Science	16
2	Omówienie pozostałych osiągnięć naukowych	17
2.1	Wyznaczenie energii granic fazowych w materiałach z pamięcią kształtu	17
2.2	Analiza deformacji diód laserowych poddanych ciśnieniu zewnętrznemu	18
2.3	Kierowanie projektami badawczymi	18
2.4	Udział w projektach badawczych	18
2.5	Referaty na międzynarodowych lub krajowych konferencjach tematycznych.	19

Rozdział 1

Osiągnięcia naukowo-badawcze

1.1 Wykaz recenzowanych prac naukowych

1.1.1 Prace opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora

1. S. Stupkiewicz, G. Maciejewski, H. Petryk
Elastic micro-strain energy of austenite-martensite interface in NiTi.
Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol. 20 (3), 035001, 2012, Impact Factor=1.387.
2. H. Petryk, S. Stupkiewicz, G. Maciejewski
Interfacial energy and dissipation in martensitic phase transformations. Part II: Size effects in pseudoelasticity,
Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 58 (3), 373-389, 2010, IF=3.705.
3. A. Czyzak, J.Z. Domagala, G. Maciejewski, Z.R. Zytikiewicz
X-ray diffraction micro-imaging of strain in laterally overgrown GaAs layers. Part I: analysis of a single GaAs stripe,
Applied Physics A, vol. 91 (4), 601-607, 2008, IF=1.765.
4. S. Kret, P. Dłużewski, A. Szczepańska, M. Żak, R. Czernecki, M. Krysko, M. Leszczyński, G. Maciejewski,
Homogenous indium distribution in InGaN/GaN laser active structure grown by LP-MOCVD on bulk GaN crystal revealed by transmission electron microscopy and X-ray diffraction,
Nanotechnology, vol. 18 (46), 465707, 2007, IF=3.652.
5. G. Maciejewski,
Plastic strain field caused by dislocations,
Physica B: Condensed Matter, vol. 401-402, 699-701, 2007, IF=0.856.

6. S. Stupkiewicz, G. Maciejewski, H. Petryk,
Low-energy morphology of the interface layer between austenite and twinned martensite,
Acta Materialia, vol. 55 (18), 6292-6306, 2007, IF=3.791.
7. G. Maciejewski, M. Sarzyński, J. Z. Domagala, M. Leszczyński,
A new method of strain determination in partially relaxed thin films,
Physica Status Solidi C, vol. 4 (8), 3048-3055, 2007.
8. G. Maciejewski, S. Kret, P. Ruterana,
Piezoelectric field around threading dislocation in GaN determined on the basis of high-
resolution transmission electron microscopy image,
Journal of Microscopy, vol. 223 (3), 212-215, 2006, IF=1.872.
9. H. Petryk, S. Stupkiewicz, G. Maciejewski,
Modeling of austenite/martensite laminates with interfacial energy effect,
**Proc. IUTAM Symp. on Size Effects on Material and Structural Behaviour at Micron-
and Nano-scales**, 151-162. Springer, 2006.
10. G. Maciejewski, S. Stupkiewicz, H. Petryk,
Elastic micro-strains at the austenite-twinned martensite interface,
Archives of Mechanics, vol. 57 (4), 277-297, 2005, IF=0.469.
11. P. Ruterana, P. Singh, S. Kret, G. Jurczak, G. Maciejewski, P. Dłuzewski, H.K. Cho, R.J.
Choi, H.J. Lee, E.K. Suh,
Quantitative evaluation of the atomic structure of defects and composition fluctuations at
the nanometer scale inside InGaN/GaN heterostructures,
Physica Status Solidi B, vol. 241 (12), 2735-2738, 2004, IF=1.349.
12. G. Maciejewski, G. Jurczak, S. Kret, P. Dłuzewski, P. Ruterana,
Evidence of strong indium segregation in MOCVD $In_xGa_{1-x}N/GaN$ quantum layers,
MRS Proceedings, vol. 798, 811-816, 2004.
13. G. Jurczak, G. Maciejewski, S. Kret, P. Dłuzewski, P. Ruterana,
Modeling of indium rich clusters in MOCVD $In_xGa_{1-x}N/GaN$ multilayers,
Journal of Alloys and Compounds, vol. 382 (1-2), 10-16, 2004, IF=2.138.
14. G. Maciejewski, P. Dłuzewski,
Nonlinear finite element calculations of residual stresses in dislocated crystals,
Computational Materials Science, vol. 30 (1-2), 44-49, 2004, IF=1.460.
15. P. Dłuzewski, G. Maciejewski, G. Jurczak, S. Kret, J. Y. Laval,
Nonlinear FE analysis of residual stresses induced by dislocations in heterostructures,
Computational Materials Science, vol. 29 (3), 379-395, 2004, IF=1.460.

16. S. Kret, G. Maciejewski, P. Dłużewski, P. Ruterana, N. Grandjean, B. Damilano, Contribution to quantitative measurement of the In composition in GaN/InGaN multilayers, **Materials Chemistry and Physics**, vol. 81 (2-3), 273-276, 2003, IF=2.356.

1.1.2 Prace opublikowane przed uzyskaniem stopnia doktora

17. P. Ruterana, S. Kret, A. Vivet, G. Maciejewski, P. Dłużewski, Quantitative analysis of composition fluctuation in InGaN quantum wells, a comparative study of molecular beam and metalorganic vapour phase epitaxial layers, **Journal of Applied Physics**, vol. 91 (11), 8979-8985, 2002, IF=2.079.
18. P. Dłużewski, G. Jurczak, G. Maciejewski, S. Kret, P. Ruterana, G. Nouet, Finite element simulation of residual stresses in epitaxial layers, **Materials Science Forum**, vol. 404-405, 141-146, 2002.
19. S. Kret, P. Dłużewski, G. Maciejewski, V. Potin, J. Chen, P. Ruterana, G. Nouet, The dislocations of low-angle grain boundaries in GaN epilayers: a HRTEM quantitative study and finite element stress state calculation, **Diamond and Related Materials**, vol. 11 (3-6), 910-913, 2002, IF=1.825.
20. P. Dłużewski, G. Maciejewski, Thermodynamics of orientation discontinuity surface: Small misorientation approach, **Archive of Mechanics**, vol. 53 (2), 105-122, 2001, IF=0.469.

1.2 Wykaz nierecenzowanych prac naukowych

1.2.1 Prace opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora

1. M. Bajda, B. Piechal, G. Maciejewski, W. Trzeciakowski, J.A. Majewski,
Pressure and temperature tuned semiconductor laser diodes,
AIP Conference Proceedings, 1399, 917-918, 2011.
2. B. Piechal, G. Maciejewski, A. Bercha, M. Reufer, A. Gomez-Iglesias, W. Trzeciakowski,
Anomalous energy shifts of the QW-transitions in red-emitting (Al)InGaP laser diodes
tuned by pressure,
AIP Conference Proceedings, 1399, 955-956, 2011.
3. S. Kret, F. Ivaldi, G. Maciejewski, M. Leszczynski, Transmission electron microscopy and
numerical modeling for the Investigation of elements composition in *InGaN/AlGaN/GaN*
multilayer,
Proceedings of Int. School and Conf. on the Physics of Semiconductors "Jaszowiec",
abstract, p.61, Krynica Zdrój, 2009.
4. H. Petryk, G. Maciejewski, S. Stupkiewicz
Interfacial energy and size effects In stress-induced martensitic microstructures,
**EMMC-10 Conference "Multi-phase and multi-component materials under dynamic lo-
ading"**, Kazimierz Dolny, Poland, 2007
5. P. Ruterana, P. Singh, S. Kret, H.K. Cho, H.J. Lee, E.K. Suh, G. Jurczak, G. Maciejewski,
P. Dluzewski,
Size and shape of In rich clusters and InGaN QWs at the nanometer scale,
Physica Status Solidi C, 7, 2381-2384, 2005.
6. G. Jurczak, S. Kret, P. Ruterana, G. Maciejewski, P. Dluzewski, A.M. Sanchez, M.A. di
Forte Poisson,
Indium rich clusters in MOCVD InGaN/GaN: high resolution electron microscopy study
and finite element modeling.
Proceedings of 13th Int. Conf. Microscopy of Semiconducting Materials, University
of Cambridge, 2003.

1.2.2 Prace opublikowane przed uzyskaniem stopnia doktora

7. P. Dłużewski, G. Maciejewski, S. Kret,
Nonlinear finite element analysis of residual stresses in semiconductor epilayers,
Proceedings of 2nd European Conference on Computational Mechanics, Kraków, 2001.

8. P. Dłużewski, G. Maciejewski, S. Kret,
Analysis of Residual Stresses in Heteroepitaxial layers,
Proceedings of 33rd Solid Mechanics Conference, Zakopane, 1999.

1.3 Wykaz prac stanowiących jednotematyczny cykl publikacji

Główne osiągnięcie naukowe wynikające z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym (Dz. U. nr 65, poz. 595 wraz z późniejszymi zmianami) stanowi cykl prac, ujętych pod wspólnym tytułem:

Numeryczna analiza deformacji struktur krystalicznych i ich defektów na poziomie nanoskali.

Powyższy cykl stanowią prace:

- H1 G. Maciejewski, P. Dłużewski,
Nonlinear finite element calculations of residual stresses in dislocated crystals,
Computational Materials Science, vol. 30 (1-2), 44-49, 2004.
- H2 G. Maciejewski, S. Kret, P. Ruterana,
Piezoelectric field around threading dislocation in GaN determined on the basis of high-resolution transmission electron microscopy image,
Journal of Microscopy, vol. 223 (3), 212-215, 2006.
- H3 G. Maciejewski, M. Sarzyński, J. Z. Domagała, M. Leszczyński,
A new method of strain determination in partially relaxed thin films,
Physica Status Solidi C, vol. 4 (8), 3048-3055, 2007.
- H4 G. Maciejewski,
Plastic strain field caused by dislocations,
Physica B: Condensed Matter, vol. 401-402, 699-701, 2007.
- H5 S. Kret, P. Dłużewski, A. Szczepańska, M. Żak, R. Czernecki, M. Krysko, M. Leszczyński, G. Maciejewski,
Homogenous indium distribution in InGaN/GaN laser active structure grown by LP-MOCVD on bulk GaN crystal revealed by transmission electron microscopy and X-ray diffraction,
Nanotechnology, vol. 18 (46), 465707, 2007.
- H6 A. Czyżak, J. Z. Domagała, G. Maciejewski, Z.R. Zytkeiwicz
X-ray diffraction micro-imaging of strain in laterally overgrown GaAs layers. Part I: analysis of a single GaAs stripe,
Applied Physics A, vol. 91 (4), 601-607, 2008.

* Oświadczenia współautorów prac, z określeniem ich indywidualnego wkładu w powstanie poszczególnych prac, znajdują się w załączniku 7.

1.4 Omówienie celu naukowego powyższych prac, osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania

Miniaturyzacja urządzeń elektronicznych prowadzi do wzmożonego zainteresowania możliwościami opisu deformacji na poziomie nanoskali. Natrafiono jednak na wiele problemów z wyznaczaniem własności mechanicznych, opisem deformacji (nielokalność oddziaływań) oraz z odmiennością właściwości materiałów na poziomie nanoskali (w porównaniu do tych na poziomie makroskali). Te odmienne właściwości, jak i specyficzne obszary zastosowań, wymuszają bardziej wysublimowane, ale też motywowane fizycznie, podejście do opisu mechanicznego. Mechanika komputerowa odgrywa coraz większą rolę w tych obszarach badań ponieważ umożliwia zrozumienie zachowania mechanicznego materiałów i pozwala na zmniejszenie kosztów wytwarzania urządzeń. W wielu przypadkach, dla zrozumienia fizycznej natury badanych zjawisk, rezultaty eksperymentalne muszą być uzupełnione lub potwierdzone modelowaniem komputerowym.

Głównym celem serii prac [H1-H6], zob. par. (1.3), było rozwinięcie i twórcze zastosowanie metod mechaniki komputerowej do analizy deformacji na poziomie nanoskali.

Dyslokacje i inne defekty struktury odgrywają dużą rolę w urządzeniach nano-wymiarowych, ze względu na ich wpływ na mechaniczne i fizyczne parametry urządzeń. Deformacje wywoływane przez dyslokacje na poziomie nanoskali były obiektem analiz w publikacjach [H1], [H2] oraz [H4]. Artykuł [H1] zawiera opis nowego podejścia do wyznaczania naprężeń wywołanych przez niskoenergetyczną granicę dyslokacyjną, podczas gdy deformacje wywoływane przez pojedynczą linię dyslokacyjną były obiektem analizy w [H4]. W przypadku urządzeń nanoelektromechanicznych, ich użyteczność oraz czas życia zależą często od rozkładu dyslokacji i ich gęstości. Wielką rolę odgrywają również odkształcenia i pola elektryczne wywoływane przez dyslokacje. Oszacowanie rozkładu pola elektrycznego wywołwanego przez dyslokację krawędziową, poprzez sprzężenie mechaniczno-elektryczne, zostało zaprezentowane w [H2]. Pole elektryczne obliczono tam na podstawie eksperymentalnie wyznaczonego pola odkształceń.

W pracach [H3], [H5] oraz [H6] analizowano deformacje wynikające z niedopasowania sieciowego warstw heterostruktury krystalicznej oraz z niejednorodności rozkładu materiału. W pracy [H3] uwagę zogniskowano na niesprężystą relaksację cienkich warstw. Zaproponowano numeryczną metodę opisu geometrycznie nieliniowych deformacji takich warstw. Jak wykazano, mechanika komputerowa może odtworzyć obserwowane wygięcia heterostruktur, co może być istotne dla projektowania diód laserowych o założonych własnościach.

Dla zrozumienia deformacji nanokrystalicznych warstw InGa_N, modelowanie numeryczne zostało zintegrowane z jakościową, wysokorozdzielczą mikroskopią elektronową [H5]. Wykorzystanie synergii obu metod umożliwiło interpretację rozkładu indu w analizowanych warstwach InGa_N. Natomiast modelowanie numeryczne w [H6] potwierdziło interpretację eks-

perymentatorów dotyczące wpływu niejednorodnego domieszkowania krzemu w warstwach epitaksjalnych o wzroście poprzecznym na wygięcie skrzydeł tych warstw. Rezultaty symulacji pomogły w interpretacji danych eksperymentalnych.

Szerszy opis celu badań i zastosowanych metod przedstawiono poniżej.

1.4.1 Deformacje zdefektowanych warstw krystalicznych - [H3]

Wyznaczenie odkształceń w częściowo zrelaksowanych cienkich warstwach. Artykuł [H3] opisuje nową metodę wyznaczania odkształceń w częściowo zrelaksowanych cienkich warstwach epitaksjalnych. Jako dane do analizy posłużyły eksperymentalnie wyznaczone promienie wygięć próbki. Niedopasowanie sieciowe między kryształami GaN a AlN (-2.5%) oraz InN (+10%) jest stosunkowo duże. Prowadzi ono do znacznego wygięcia struktury epitaksjalnej, a po przekroczeniu grubości krytycznej rosnącej warstwy skutkuje nukleacją defektów. Pomiar krzywizny wygiętej próbki, ze względu na swą prostotę, jest często stosowany dla sprawdzenia stopnia zrelaksowania warstw epitaksjalnych. Metoda ta pozwala na badania odkształceń in-situ. Gdy próbka nie zawiera dyslokacji niedopasowania, pomiar wygięcia próbki pozwala na wyznaczenie naprężeń w próbce poprzez wzór Stoney'a [Stoney, Proc. R. Soc. Lond. A, 1909]. Wzór ten wyprowadzono zakładając następujące uproszczenia: grubość filmu jest bardzo mała w porównaniu do grubości podłoża; materiały filmu i podłoża są jednorodne, izotropowe i liniowo sprężyste; niedopasowanie sieci jest małe. Stąd formalizm nieskończenie małych odkształceń i obrotów jest w tym przypadku adekwatny.

Powszechnie wiadomo, że klasyczny już wzór Stoney'a nie sprawdza się dla cienkich warstw zawierających dyslokacje niedopasowania (co też wynika z założeń przy jego wyprowadzeniu). Wynika stąd potrzeba metody pozwalającej na opis deformacji (parametrów sieciowych) warstw epitaksjalnych, w których zaszła niesprężysta relaksacja energii. W artykule [H3] zaproponowano podejście numeryczne wykorzystujące metodę elementów skończonych (MES) oraz mechanikę kontynualną w zakresie skończonych deformacji.

Główne założenie dotyczące fizyki deformacji określono następująco: większość z dyslokacji niedopasowania relaksowanej cienkiej warstwy powstaje na jej dolnej powierzchni. Jako wskaźnik stopnia relaksacji warstwy przyjęto promień wygięcia próbki. W pracy [3] przedstawiono 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 [0001]. Dla zbadania użyteczności zaproponowanej metody, porównano wyniki otrzymane z zaproponowanego modelu numerycznego z wynikami pomiarów za pomocą dyfrakcji rentgenowskiej. Dodatkowo wprowadzono parametr niezbędny do uwzględnienia nukleacji dyslokacji w cienkich warstwach, który opisuje zwiększoną ilość masy na podłożu z dyslokacjami.

Dwa elementy proponowanej metody są nowe w stosunku do obecnie istniejących:

- Pierwszy, to wprowadzenie stopnia relaksacji cienkiej warstwy (gęstości dyslokacji) na górnej jej powierzchni. Założono, że gęstość dyslokacji na górnej powierzchni warstwy jest połową gęstości dyslokacji na jej dolnej powierzchni. Wydaje się, że rozkład całkowitej energii sprężystej na energię dyslokacji niedopasowania i energię wygięcia próbki byłby właściwszym. Ponieważ energia zbioru dyslokacji zależy od ich interakcji, takie rozpartycjonowanie energii w ogólnym przypadku nie jest możliwe. Należy nadmienić, że mechanizm relaksacji jest złożony i zależy od warunków wzrostu epitaksjalnego, grubości poszczególnych warstw i wielu innych parametrów. Dlatego też, przyjęcie powyższego założenia traktować trzeba jako przybliżone, ale i niezbędne, dla zachowania prostoty opisu deformacji. Wprowadzone założenie wynika z naszej niedostatecznej wiedzy o mechanizmach rządzących relaksacją nanostruktur.
- Drugi, to uwzględnienie zależności objętości warstwy kryształu (masy) podczas wzrostu epitaksjalnego z fazy gazowej lub ciekłej od ilości kolumn atomowych podłoża. Nukleacja dyslokacji niedopasowania na powierzchni rozdziału warstwa/podłoże prowadzi do wzrostu ilości kolumn atomowych rosnącej warstwy (lub zmniejszenia, w przypadku wektora Burgersa skierowanego przeciwnie). Jak więc pokazano w [H3], koniecznym jest wprowadzenie parametru opisującego dodatkową masę warstwy (w stosunku do masy warstwy wzrastającej na podłożu bez dyslokacji). W mojej opinii, powyżej opisany czynnik dodatkowej masy warstwy powinien być włączony do opisu deformacji zrelaksowanych lub częściowo zrelaksowanych cienkich warstw nanokrystalicznych.

Stopień zrelaksowania warstw otrzymano poprzez numeryczne dopasowanie krzywizny próbki do krzywizny zmierzonej eksperymentalnie. Doskonała zgodność wyników modelowania z eksperymentalnie zmierzonymi parametrami sieciowymi (dyfrakcja rentgenowska) pozwala sądzić, że zaproponowana metoda będzie użyteczna do opisu parametrów sieciowych częściowo zrelaksowanych warstw epitaksjalnych.

Azotki należą do kryształów wykazujących silne efekty piezoelektryczne. Dlatego przeprowadzono analizę wpływu efektu sprzężenia elektro-mechanicznego na otrzymane wartości wygięć próbek. Okazało się, że efekt piezoelektryczny nie miał istotnego wpływu w analizowanym zagadnieniu.

Artykuł [H3] powstał w wyniku współpracy w ramach kierowanego przeze mnie grantu „Wpływ warunków wzrostu epitaksjalnego na samonapężenia, pękanie i formowanie się kropek kwantowych w warstwach azotkowych”, zob. par. (2.3). Pomysł metody został zaproponowany przeze mnie. Część eksperymentalna tj. wzrost próbek, ich charakteryzacja, pomiary parametrów sieci i wygięć próbek została wykonana przez współautorów. Ja napisałem pierwszą wersję artykułu (poza częścią opisującą eksperymenty), podczas gdy ostateczna wersja jest wynikiem pracy wszystkich autorów.

1.4.2 Analiza deformacji sieci krystalicznych wywoływanych przez defekty - [H1,H2,H4]

Wyznaczanie naprężeń wywoływanych przez granice dyslokacyjne. Dostępne metody obliczeniowe do wyznaczania naprężeń i orientacji sieci wywoływanych przez dyslokacje są stosunkowo skromne. Jest to szczególnie widoczne w porównaniu do metod komputerowych przeznaczonych do konstrukcji inżynierskich w makroskali. Opisy efektów związanych z dyslokacjami opierają się zwykle na liniowej teorii sprężystości. Wyrażenia analityczne dla naprężeń, powszechnie stosowane w literaturze, uwzględniają zwykle jedynie izotropię sprężystą oraz pomijają nieciągłości w obszarze rdzenia dyslokacji.

Rola metod analitycznych i semi-analitycznych zastępowana jest obecnie przez metody numeryczne, w tym głównie przez metodę elementów skończonych. W literaturze można znaleźć tylko kilka przykładów zastosowania metody elementów skończonych wraz z formalizmem skończonych deformacji oraz teorii dyslokacji do wyznaczenia pól naprężeń pochodzących od dyslokacji. Inny sposób symulacji komputerowych dyslokacji zapewniają dynamika molekularna i dynamika dyslokacji. Jednak obie te grupy, ze względu na duże wymagania sprzętowe, nie mogą być używane do symulacji dużych obszarów materiału.

W artykule [H1] zaprezentowano nowe podejście do wyznaczania naprężeń wywoływanych przez dyslokacje w materiale anizotropowym. W pracy przedstawiono przykład numeryczny oraz potencjalny obszar zastosowań. Celem artykułu [H1] była prezentacja numerycznego wyznaczenia pola naprężeń wywołanego przez założony rozkład dyslokacji oraz praktyczne wykorzystanie kontynuualnej teorii dyslokacji w celu uzyskania nie tylko jakościowego, ale i ilościowego opisu deformacji związanych z dyslokacjami na poziomie nanoskali. Opis zawiera nie tylko symetryczną część niesprężystych dystorsji, ale też niesymetryczną. Daje to możliwość precyzyjnego opisu odpowiedzi odkształcenie-naprężenie oraz opisu rotacji sieci krystalicznej. Zaprezentowana metoda bierze pod uwagę pełną anizotropię materiału, ewentualną skomplikowaną geometrię próbki, a także efekty skończonych deformacji. W celu pokazania zalet proponowanej metody, naprężenia wyznaczone wokół niskokątowej granicy dyslokacyjnej porównano z rozwiązaniem znanym z liniowej teorii dyslokacji.

Praca [H1] powstała w wyniku współpracy z P. Dłużewskim (promotorem mojego przewodu doktorskiego). Wykorzystaliśmy algorytm zaproponowany przez współautora. Ja wykonałem obliczenia i dokonałem porównań z rozwiązaniem z liniowej teorii dyslokacji. Przygotowanie manuskryptu i jego korekty zostały wykonane wspólnie.

Deformacje wywoływane przez pojedynczą dyslokację. W pracy [H4] zaproponowałem metodę wyznaczania pola deformacji niesprężystych wywołanego przez pojedynczą linię dyslokacji. Przez deformacje niesprężystą rozumiem „eigen-deformation” lub, w terminologii używanej przez Kröner’a deformację plastyczną, która jest niezbędna do powstania dyslokacji. Wyznaczenie pola deformacji niesprężystych wywołanego przez dyslokację jest kluczowe dla prawidłowego opisu energetycznego dyslokacji. Zaproponowana metoda wyko-

rzystuje kontynuálną teorię dyslokacji oraz metodę elementów skończonych. Przedstawiono przykłąd opisu energetycznego dyslokacji śrubowej w krzemie. Wyznaczono energię rdzenia dyslokacji. Weryfikacje moŹliwości zaproponowanej metody dokonano poprzez porównanie uzyskanych rezultatów z analogicznymi z dynamiki molekularnej. Bardzo dobra zgodność uzyskanych wyników potwierdza, Źe zaproponowana metoda moŹe rozszerzyć stosowalność metod mechaniki kontinuum, a tym samym zwiększyć jej moŹliwości. Jako przykłąd moŹna podać szeroko stosowany model Peierls'a-Nabarro, w którym deformacja niesprężysta zlokalizowana jest w płaszczyźnie poślizgu. Zaproponowana metoda umoŹliwia zweryfikowanie tego załoŹenia.

Metoda zaprezentowana w pracy [H4] umoŹliwia precyzyjne wyznaczenie energii rdzenia dyslokacji oraz rozmiaru fizycznego rdzenia dyslokacji. PoniewaŹ do wyznaczenia dwóch powyŹszych wielkoŹci nie jest wymagany potencjał międyatomowy, taka uproszczona metoda moŹe znaleźć zastosowanie do materiałó, dla których brakuje potencjału międyatomowego. Trzeba jednak zaznaczyć, Źe pełne sprawdzenie zaproponowanej metody wymaga znacznie szerszych badań.

Wydaje się, Źe głównym ograniczeniem zaproponowanej metody jest fakt pominięcia w opisie dyskretnej budowy materii. Jednak w przypadku, gdy dla danego materiału brak jest potencjału międyatomowego lub gdy jego wartoŹciowość pozostawia wiele do Źyczenia, wspomniane ograniczenie staje się zaletą. Do wyznaczenia energii rdzenia dyslokacji potrzebne są tylko moduły sztywności kryształu.

Pole elektryczne wywoływane przez dyslokację. W pracy [H2] zaproponowałem nową metodę wyznaczenia pola elektrycznego wokół dyslokacji.

Podjęto ostatnio wiele prób wyznaczenia pola elektrycznego wokół dyslokacji oraz ładunku zgromadzonego na linii rdzenia dyslokacji. Wykorzystuje się do tego kilka metod: holografię elektronową, balistyczną mikroskopię elektronową (the ballistic electron emission microscopy) w połączeniu z elektrostatycznym modelowaniem rozkłądu potencjału; skaningową mikroskopię potencjału powierzchni (the scanning surface potential microscopy). Rozkłąd potencjału elektrycznego wokół dyslokacji jest rezultatem nakładania się potencjału pochodzącego od ładunków zgromadzonych na rdzeniu dyslokacji oraz potencjału wywoływanego przez pole odkształceń (poprzez sprzęŹenie mechaniczno-elektryczne).

Zaproponowana metoda została zilustrowana na przykłądzie cienkiej warstwy GaN'u. Pole elektryczne wokół dyslokacji zostało wyznaczone w dwóch krokach: wyznaczenie pola odkształceń sprężystych na bazie wysokorozdzielczej mikroskopii elektronowej (HRTEM) i przy uŹyciu metody fazy geometrycznej, numerycznego wyznaczenia rozkłądu potencjału elektrycznego. Próbki do obserwacji mikroskopowych i obrazy mikroskopowe zostały wykonane przez P. Ruterana (CNRS-ENSICAEN, Caen, Francja), analizę metodą fazy geometrycznej wykonał S. Kret (Instytut Fizyki PAN, Warszawa). Analiza powyŹsza moŹe dostarczyć cztery składowe tensora dystorsji sieci. Poprzez efekt piezoelektryczny odkształcenia wywoływają pole elektryczne. Tak więc, po wyznaczeniu pola odkształceń sprężystych moŹna wyznaczyć rozkłąd pola

elektrycznego na podstawie sprzężenia piezoelektrycznego.

W pracy [H2] zaprezentowano relatywnie proste podejście dające jednak cenną informację o rozkładzie pola elektrycznego wywoływanego przez dyslokację w bardzo cienkiej próbce materiału. Wykorzystując tą metodę można dokonać dekompozycji pola elektrycznego na pole pochodzące od ładunku zgromadzonego na linii rdzenia dyslokacji i pole pochodzące od odkształceń.

Próbki i obraz HRETM zostały wykonane przez P. Ruterana; analizę metodą fazy geometrycznej wykonał S. Kret, podczas gdy ja byłem pomysłodawcą badań, wykonałem modelowanie numeryczne, implementację numeryczną i napisałem pierwszą wersję artykułu (poza opisem części eksperymentalnej i tej dotyczącej analizy obrazu mikroskopowego). Przyjęcie warunków brzegowych poprzedzone było długą dyskusją ze S. Kretem. Końcowa wersja artykułu jest wynikiem pracy wszystkich autorów. Artykuł [H2] powstał w wyniku współpracy w ramach kierowanego przeze mnie grantu „Wpływ warunków wzrostu epitaksjalnego na samonapężenia, pękanie i formowanie się kropek kwantowych w warstwach azotkowych”, zob. par. (2.3).

1.4.3 Deformacje (prawie) bezdefektowych warstw krystalicznych - [H5,H6]

W dwóch interdyscyplinarnych pracach [H5] i [H6] celem mojej pracy było takie modelowanie komputerowe deformacji nanostruktur by umożliwić uzyskanie nowych informacji eksperymentalnych lub by pomóc w interpretacji już otrzymanych wyników eksperymentów. W pracy [H5] zaprezentowano szeroko zakrojoną analizę wyznaczania koncentracji indu w warstwach $In_xGa_{1-x}N$ na podstawie obrazów wysokorozdzielczej mikroskopii elektronowej (HRTEM). Równoległe wykonano bezpośrednie porównanie wyników z analizy mikroskopowej z wynikami dyfrakcji rentgenowskiej na tych samych próbkach. Głównym celem pracy [H5] było przedstawienie i opis struktury krystalograficznej studni kwantowych InGaN/GaN wzrastających na nisko-defektowych podłożach kryształu GaN-u. Dyslokacje nie wpływały na segregację indu, ze względu na sieciowo dopasowane podłoże. Dodatkowo możliwe było uzyskanie danych eksperymentalnych z obrazów HRTEM oraz z wysokorozdzielczej dyfrakcji rentgenowskiej (HRXRD), wolnej od artefaktów związanych z dyslokacjami.

Możliwość wyznaczenia profilu składu chemicznego na powierzchni dwu faz materiałów jest obecnie kwestionowana. Dla wyznaczenia takiego profilu przeprowadzono serię symulacji próbek nano-metrycznej wielkości. Wyznaczono ich deformacje w płaszczyźnie XY (X jest kierunkiem równoległym do osi [0001] kryształu heksagonalnego, Y jest kierunkiem wiązki elektronowej). W przeprowadzonych symulacjach wzięto pod uwagę efekty relaksacji cienkiej folii, warunki brzegowe podczas obserwacji mikroskopowej, geometrię wielokrotnych studni kwantowych, nieliniowe efekty geometryczne deformacji możliwe do opisanego w ramach formalizmu skończonych deformacji. Relaksacja powierzchniowa poprzecznego przekroju próbek mikroskopowych skutkuje przemieszczeniami w kierunkach X i Y. Przemieszczenia w

kierunku Z są znikome. Wykorzystując rezultaty symulacji numerycznych (przemieszczenia), wygenerowano pozycje atomów w zdeformowanej, trójwymiarowej komórce heterostruktury nakładając obliczone przemieszczenia $u_x(X, Y, Z)$, $u_y(X, Y, Z)$ w płaszczyźnie XY na pozycje każdego z atomów (Ga, N, In) idealnej sieci. Przyjęto zerowe przemieszczenia w kierunku Z, tj. $u_z(X, Y, Z) = 0$.

Obliczenia metodą elementów skończonych dały możliwość wyznaczenia deformacji cienkiej folii, a połączone z symulacjami obrazów mikroskopowych dały możliwość oszacowania rozmycia interfejsu międzyfazowego. Obrazy mikroskopowe wytworzone poprzez symulacje numeryczne były korelowane z obrazami mikroskopowymi otrzymanymi z eksperymentu.

Artykuł [H3] jest rezultatem współpracy w ramach kierowanego przeze mnie grantu „Wpływ warunków wzrostu epitaksjalnego na samonapężenia, pękanie i formowanie się kropek kwantowych w warstwach azotkowych”, zob. par. (2.3). Pomysł pracy jest zasługą S. Kreta, który także koordynował wszystkie prace. Ja byłem odpowiedzialny za modelowanie numeryczne. Wyniki moich obliczeń zostały wykorzystane przez S. Kreta do analizy rozkładu indu w studniach kwantowych i do wykonania symulacji obrazów mikroskopowych. Próbkę wykonano i zcharakteryzowano w Instytucie Wysokich Ciśnień PAN i w firmie TopGaN, obserwacje mikroskopowe i analiza HRTEM były wykonane przez autorów z Instytutu Fizyki PAN w Warszawie (w tym głównie przez S. Kreta). Manuskrypt pracy został napisany przez S. Kreta. Końcowa wersja artykułu jest wynikiem pracy wszystkich autorów.

Artykuł [H6] prezentuje studium odkształceń w warstwie GaAs:Si rosnącej przy użyciu epitaksji z fazy ciekłej metodą poprzecznego narastania (liquid phase epitaxial lateral overgrowth - ELO) na podłożu GaAs maskowanym SiO₂. Dyfrakcja rentgenowska została użyta do pomiaru kształtu płaszczyzn pasków ELO. Poprzez eksperyment wykazano, że gdy maska SiO₂ zostanie usunięta, swobodne skrzydła ELO wyginają się ku górze. Wygięcie to jest wynikiem naprężeń residualnych. Źródła tych naprężeń upatrywano w niejednorodnym domieszkowaniu krzemem. W celu sprawdzenia tej hipotezy, przeprowadziłem modelowanie relaksacji swobodnych skrzydeł ELO. W symulacjach założono uproszczony model skrzydła. Odkształcenia niedopasowania związane z niejednorodnym domieszkowaniem krzemem w części skrzydła modelowane były jako odkształcenia niesprężyste. Model mechaniczny uproszczono do dwuwymiarowego. Jak pokazują wyniki symulacji numerycznych, niedopasowanie sieciowe na połączeniu skrzydło/podłoże ma istotny wpływ na kształt wygięcia płaszczyzn skrzydła znajdujących się blisko okna wzrostu. Poprzez włączenie do opisu powyższego niedopasowania, w symulacjach uzyskano zakrzywienia płaszczyzn sieciowych zgodne z wynikami obserwacji eksperymentalnych.

Biorąc pod uwagę niezbędne uproszczenia wprowadzone do modelu numerycznego, zgodność wyników uzyskanych z symulacji numerycznych i pomiarów eksperymentalnych jest bardzo dobra. Pozwala to na stwierdzenie, że interpretacja eksperymentatorów, jakoby źródłem wygięć skrzydeł ELO była niejednorodność domieszkowania, jest prawdziwa.

Pomysł pracy zastał zaproponowany przez Z. Żytkiewicza (Instytut Fizyki PAN, Warszawa).

On i członkowie jego grupy przeprowadzili wszystkie elementy analizy poza modelowaniem numerycznym. Model mechaniczny skrzydła ELO, jego uproszczenie, oprogramowanie elementu skończonego oraz przeprowadzenie symulacji i postprocessing zostały wykonane przeze mnie.

Handwritten signature

1.4.4 Podsumowanie - najważniejsze osiągnięcia przeprowadzonych badań

Publikacje [H1-H6] można traktować jako mały krok do zrozumienia deformacji na poziomie nanoskali.

Otrzymano następujące oryginalne rezultaty:

- Zaprezentowano nowe podejście do rozwiązania zagadnienia wyznaczenia naprężeń od założonego rozkładu dyslokacji [H1]. Podano porównanie z rozwiązaniem z liniowej teorii sprężystości dla nisko-energetycznej granicy dyslokacyjnej.
- Zaproponowano nową metodę wyznaczenia rozkładu pola elektrycznego wokół dyslokacji, będącego efektem połączenia pola naprężeń dyslokacji i sprzężeń elektro-mechanicznych [H2].
- Zaproponowano nową metodę wyznaczenia deformacji częściowo zrelaksowanych cienkich warstw [H3].
- W artykule [H3] zaproponowano wprowadzenie parametru dodatkowej objętości (masy) cienkiej warstwy, który opisuje liczbę kolumn atomowych w rosnącej warstwie.
- Zaproponowano nową metodę wyznaczania odkształceń niesprężystych powodowanych przez pojedyncze dyslokacje [H4].
- Metoda zaproponowana w artykule [H4] pozwala ponadto na precyzyjne wyznaczenie energii rdzenia dyslokacji oraz szerokości fizycznego rdzenia dyslokacji. Taka uproszczona metoda może być zastosowana do materiałów, dla których brak potencjałów międzyatomowych lub brak dostatecznie dobrych potencjałów międzyatomowych. Do wyznaczenia energii rdzenia dyslokacji nie potrzeba potencjałów międzyatomowych.
- Interdyscyplinarna praca [H5] pokazuje m.in. sposób, w jaki można połączyć dwie techniki eksperymentalne z modelowaniem numerycznym, by uzyskać informacje o rozkładzie materiału (np. indu) w nano-metrycznych próbkach.
- Wyniki metody elementów skończonych zaprezentowane w [H5] pozwalają zrozumieć wpływ relaksacji cienkiej folii na rozkład przestrzenny faz materiału. Dodatkowo, można oszacować rozmycie powierzchni, a także porównać te wyniki z tymi z symulacji obrazów mikroskopowych. Wnioski z takiej analizy mogą posłużyć do optymalizacji diód laserowych.
- Rezultaty modelowania numerycznego przedstawionego w [H6] potwierdzają interpretację zaproponowaną przez eksperymentatorów odnośnie źródła wygięcia swobodnych części struktur epitaksjalnych, które analizowano w pracy.

1.5 Sumaryczny impact factor publikacji naukowych według listy Journal Citation Report (JCR).

- Sumaryczny impact factor publikacji przed uzyskaniem stopnia doktora ¹: 4.373
- Sumaryczny impact factor publikacji po uzyskaniu stopnia doktora ¹: 26.26
- Sumaryczny impact factor moich publikacji ¹: 30.633

1.6 Liczba cytowań publikacji i index Hirscha według bazy Web of Science

- Liczba cytowań publikacji ²: 136
- Index Hirscha ²: 6

¹JCR Science Edition 2010.

²Dane z 12.03.2012.

Rozdział 2

Omówienie pozostałych osiągnięć naukowych

2.1 Wyznaczenie energii granic fazowych w materiałach z pamięcią kształtu

Kilka artykułów (zob. par. (1.1.1)_{1,2,6,9,10}) powstało jako rezultat współpracy z H. Petrykiem i S. Stupkiewiczem (IPPT PAN Warszawa). Ten program badawczy kierowany był przez H. Petryka, podczas gdy ja zajmowałem się numeryczną stroną analizy. Głównym celem pracy było wyznaczenie energii powierzchniowej w dwóch stopach wykazujących właściwości pamięci kształtu, mianowicie CuAlNi oraz NiTi. Analiza przeprowadzona została przy użyciu mechaniki ośrodków ciągłych. Powierzchnia połączenia materiałów na poziomie mikro- lub nanoskali traktowana była jako niejednorodny obszar z odpowiednio przestrzennie rozłożonymi fazami. Poprzez wykonanie symulacji metodą elementu skończonego wyznaczono energie sprężyste dla różnych kształtów połączeń faz. Tak wyznaczona energia, na wyższym poziomie, może być traktowana właśnie jako energia powierzchniowa. Podobnie jak energia granicy ziaren jest bardzo niejednorodnie rozłożona na poziomie nanoskali, podczas gdy w makroskali może ona być traktowana jako jednorodna. W szczególności w publikacji (1.1.1)₆, problem został sformułowany jako zagadnienie optymalizacji kształtu i przestrzennego rozkładu faz. Minimalizowanym funkcjonałem była energia sprężysta. Bazując na danych materiałowych dostarczonych i wyznaczonych przez S. Stupkiewicza, przeprowadziłem analizę wrażliwości i optymalizację energii powierzchniowej. Artykuł (1.1.1)₁₀ zawiera dodatkowe modyfikacje. Wykorzystano rozszerzoną metodę elementu skończonego (X-FEM) do lepszego opisu nieciągłego pola odkształcenia na powierzchniach. Dodatkowo użyto formalizmu metody „level-set” do efektywnego opisu przestrzennego rozkładu faz materiału i powierzchni pomiędzy fazami. Wykonałem część numeryczną powyższych analiz.

2.2 Analiza deformacji diód laserowych poddanych ciśnieniu zewnętrznemu

Komunikaty konferencyjne (1.2.1)₁ oraz (1.2.1)₂ zawierają wstępne wyniki analiz, w które byłem ostatnio zaangażowany. Ten program badawczy kierowany jest przez W. Trzeciakowskiego z Instytutu Wysokich Ciśnień PAN. W ramach tego programu przeprowadziłem modelowanie diód laserowych (DL) montowanych na kilku podłożach. Wyniki symulacji komputerowych (zakrzywienia próbek) zostały zweryfikowane pomiarami wygięć DL. Odkształcenia w DL mają duży wpływ na emisję energii przez LD. Poprzez numeryczne wyznaczenie odkształceń w DL uzyskaliśmy informacje o stopniu zrelaksowania na powierzchni DL/podłoże.

2.3 Kierowanie projektami badawczymi

1. Wpływ warunków wzrostu epitaksjalnego na samonapężenia, pękanie i formowanie się kropek kwantowych w warstwach azotkowych (grant MNiI nr 8 T07A 010 26).
2. Dyslokacje i odkształcenia plastyczne na poziomie nanoskali (grant MNiI nr N N501 092135).

2.4 Udział w projektach badawczych

1. Wykorzystanie tensorowych miar defektów struktury do analizy samonapężeń i dystorsji sieci w warstwach epitaksjalnych,
grant KBN 7 T07A 004 16, wykonawca
2. Analiza mikromechaniczna i modelowanie materiałów o zmiennych, złożonych strukturach martenzytycznych indukowanych naprężeniowo,
grant KBN nr 8 T07A 044 20, wykonawca
3. Modelowanie numeryczne wydzielań indu w studniach kwantowych $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$,
projekt POLONIUM, wykonawca
4. Technologie wytwarzania wyrobów z metali i stopów o strukturze manometrycznej,
grant KBN nr PBZ-KBN-096/T08/01, wykonawca
5. Wieloskalowe modelowanie mikromechaniczne stopów z pamięcią kształtu w złożonych stanach naprężenia,
grant MNiI nr 4T07A 032 26, wykonawca
6. Kompozyty i nanokompozyty ceramiczno-metalowe dla przemysłu lotniczego i samochodowego (KomCerMet),
POIG 01.03.01-00-013/08, wykonawca

7. Micro and Nanocrystalline Functionally Graded Materials for Transport Applications (MATRANS), projekt ramowy UE, wykonawca
8. Efekty energii granic strukturalnych w wieloskalowym modelu mikromechanicznym dla stopów z pamięcią kształtu, grant MNiI nr N N501 267734, wykonawca

2.5 Referaty na międzynarodowych lub krajowych konferencjach tematycznych.

11th U.S. National Congress on Computational Mechanics,
Minneapolis and St. Paul, Minnesota, USA, 25.07 - 28.07, **2011**

ISDMM11 - 5th International Symposium on Defect and Material Mechanics
Sevilla, Hiszpania, 27.06 - 01.07, **2011**

Thin Film & Small Scale Mechanical Behavior (GRC Conference)
Waterville, USA, 24.07 - 31.07, **2010**

I Kongres Mechaniki Polskiej
Warszawa, Polska, 28.08 - 31.08, **2007**

24th International Conference on Defects in Semiconductors
Albuquerque, USA, 22.07 - 27.07, **2007**

Thin Film & Small Scale Mechanical Behavior (GRC Conference)
Waterville, USA, 30.07 - 04.08, **2006**

MIM2003 - Workshop on Micromechanics of Inelastic Materials
Warszawa, Polska, 23.04 - 25.04, **2003**

CMS2001 - Workshop on Computational Material Science
Villasimius, Włochy, 17.09 - 23.09, **2001**

SolMech - 33rd Solid Mechanics Conference
Zakopane, Polska, 02.09 - 05.09, **2000**,

Multiscale Phenomena in plasticity: from Experiments to Phenomenology, Modelling & Material Engineering
Ouranopolis, Grecja, 08.09 - 19.09, **1999**