

Dr hab. inż. Ryszard B. Pęcherski, prof. PK
Katedra Wytrzymałości Materiałów
Instytut Mechaniki Budowli
Wydział Inżynierii Łądowej
Politechniki Krakowskiej
Ul. Warszawska 24
31-155 Kraków

Kraków, 7 grudnia 2005 r.

**Recenzja pracy doktorskiej mgr inż. Grzegorza Jurczaka
pt.: „Analiza sprężysta kryształów. Analiza i modelowanie numeryczne metodą
elementów skończonych”**

Recenzowana rozprawa dotyczy ważnego i aktualnego zagadnienia modelowania stanu naprężenia i odkształcenia w heterostrukturach epitaksjalnych. Praca liczy 130 stron, poza spisem treści składa się z sześciu rozdziałów, trzech dodatków oraz obszernej listy cytowanej literatury, która zawiera 281 pozycji. Dołączono także spis rysunków i ilustracji. Celem było opracowanie narzędzia obliczeniowego, przy pomocy którego można modelować w sposób adekwatny skończone deformacje sprężyste i stany naprężenia w kryształach z uwzględnieniem ich anizotropii sprężystej, w szczególności w zdefektowanych warstwach epitaksjalnych.

Lektura pracy wykazuje, że jej zawartość jest zgodna z tytułem oraz postawionym celem. Doktorant dokonał obszernego przeglądu podstaw nieliniowej teorii sprężystości oraz modeli materiału hipersprężystego. Szczególną uwagę poświęcono nieliniowemu modelowaniu deformacji hipersprężystych kryształów z uwzględnieniem ich anizotropii sprężystej. Rozważa się nieliniowość geometryczną, przyjmując za miarę odkształcenia uogólniony tensor odkształcenia Lagrange'a, oraz nieliniowość materiałową, zachowując w rozwinięciu funkcji energii sprężystej wokół stanu równowagi wyrazy drugiego oraz trzeciego rzędu. Pozwala to wykorzystać znane z literatury stałe sprężyste drugiego i trzeciego rzędu dla różnych struktur krystalicznych. Przytaczając znany z literatury fakt, że stałe sztywności drugiego rzędu nie zależą od przyjętej miary odkształcenia, Autor wykazuje jednocześnie, że stałe sprężyste trzeciego rzędu zależą od przyjętej miary odkształcenia. W szczególności wyprowadza wzory opisujące zmianę niezależnych stałych sprężystych trzeciego rzędu kryształu o symetrii wurcytu przy zmianie miary odkształcenia, por. równania (3.45), str. 49. Jest to jedno z oryginalnych osiągnięć Doktoranta. Zagadnienie to jest przedstawione szczegółowo w dodatku A. Innym ważnym osiągnięciem Autora jest opracowanie własnego algorytmu obliczeniowego i napisanie programu, który został włączony jako „user element” do otwartego systemu elementów skończonych FEAP. Zagadnienia dotyczące algorytmu obliczeniowego metodą elementów skończonych przedstawiono w rozdziale 4. W rozdziale 5 przedstawiono oryginalną metodę postępowania przy wyznaczaniu naprężeń residulanych w samonaprzężonych nanostrukturach, która składa się z następujących etapów:

- Analiza obrazów uzyskanych z wysokorozdzielczego mikroskopu elektronowego (HRTEM).

- Wybór materiału referencyjnego dla poszczególnych składników heterostruktury.
- Opis geometrii heterostruktury.
- Dyskretyzacja modelowanego obszaru heterostruktury.
- Identyfikacja składu chemicznego, parametrów sieci i stałych materiałowych poszczególnych elementów skończonych.
- Przyjęcie odpowiednich warunków brzegowych.
- Rozwiązanie numeryczne zadania brzegowego i analiza wyników obliczeń.

Powyższą metodę zilustrowano przykładami obliczeń naprężeń niedopasowania w heterostrukturze półprzewodnikowej GaAs/ZnTe/CdTe oraz stanu naprężenia wokół dyslokacji krawędziowej i dyslokacji Schockleya w kryształach miedzi. Obliczenia numeryczne skonfrontowano z obserwacjami doświadczalnymi badanych struktur z zastosowaniem techniki HRTEM. Przeprowadzono także numeryczną analizę sprężystej relaksacji heterostruktury epitaksjalnej InGaN/GaN w celu porównania otrzymanych wyników obliczeń z obrazami uzyskanymi z obserwacji metodą HRTEM. Analiza ta posłużyła do określenia koncentracji Indu w studniach kwantowych $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

Dokładniejsza analiza pracy budzi następującą refleksję. W kryształach poddanych dowolnie dużym deformacjom sprężystym następuje w ogólności zmiana jego symetrii. Zmienia się, zatem także, ze zmianą odkształcenia, symetria tensora sztywności. Na przykład komórka kryształu układu regularnego, po rozciągnięciu wzdłuż jednej z krawędzi przekształca się w prostopadłościan, któremu będzie odpowiadać symetria układu tertragonalnego. Drugim przykładem może być ścinanie powodujące zmianę kątów między krawędziami komórki regularnej, co może prowadzić do symetrii układu trójskośnego. Proponowany w pracy opis nieliniowości sprężystej przez dopuszczenie członu trzeciego rzędu w rozwinięciu funkcji energii sprężystej wokół stanu równowagi nie daje możliwości uwzględnienia wspomnianej zmiany symetrii, gdyż zachowujemy symetrię kryształu w stanie równowagi. Poza tym, założenie rozwinięcia funkcji energii sprężystej w szereg i odrzucenie wyrazów wyższego rzędu niż trzeci, daje wprawdzie możliwość wyjścia poza zakres liniowy oraz poza infinitesimalne odkształcenia, nakłada jednak ograniczenie na ich wielkość. Nie daje to, zatem możliwości opisu deformacji kryształu z pełną nieliniowością geometryczną. Wolne od tych ograniczeń są obliczenia ab initio, w których uwzględnia się w pełni zmianę konfiguracji jonów (węzłów sieci krystalicznej), a zatem i zmianę symetrii komórki elementarnej. Wydaje się, że byłoby pożyteczne wykonanie w przyszłości obliczeń testowych, które dałyby możliwość porównania wyników obliczeń według programu Autora z obliczeniami ab initio. Można byłoby wtedy dokonać oceny dokładności proponowanego w pracy podejścia.

Do drobniejszych uwag należy następująca. Na str. 20 Autor sugeruje, że Mehrabadi i Cowin (1990) oraz Sutcliffe (1992) wyprowadzili tensory definiujące stany własne anizotropowych symetrii. Pominięto natomiast informację, że wcześniej zagadnienie sprężystych stanów własnych było omawiane przez Rychlewskiego w cytowanej zresztą przez Autora w innym miejscu pracy z 1983 r. Bardziej znana praca Rychlewskiego na ten temat była wydana w 1984 r. w *Praktycznej Matematyce i Mechanice*. Kilka drobnych usterek redakcyjnych wyjaśniłem bezpośrednio z Autorem i nie będę ich tu przytaczał.

