

Leszek Adamowicz
dr hab., prof. emerytowany
Wydział Fizyki Politechniki Warszawskiej

Warszawa, 9 marca 2015 r.

**Ocena rozprawy doktorskiej mgr Anny Korbeckiej
p.t. „Teoria i modelowanie struktur półprzewodnikowych
z modulowaną magnetyzacją”**

wykonana na zlecenie Dziekana Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego
prof. dr hab. Teresy Rzący – Urban

Uwagi ogólne

Przedstawiona do oceny praca doktorska dotyczy teoretycznych metod badania struktur półprzewodnikowych typu studni kwantowych i supersieci, możliwych do realizacji poprzez wykorzystanie zaawansowanych metod technologicznych epitaksjalnego wzrostu kryształów. Tak otrzymywane sztuczne struktury są nie tylko intrygujące z punktu widzenia własności fizycznych. Przyczyniają się do tworzenia nowych, trwalszych i wydajniejszych przyrządów półprzewodnikowych, mających zastosowanie w elektronice, optoelektronice i elektronice spinowej. Zasadniczym celem pracy było stworzenie wydajnych i łatwych do wykorzystania narzędzi obliczeniowych, pozwalających wyznaczać stacjonarne stany kwantowe i energie elektronów w przypadku różnych konfiguracji materiałowych i geometrycznych. Podjęta problematyka posiada dużą wartość praktyczną, gdyż przyczynia się do rozwoju ilościowych metod przewidywania właściwości fizycznych realnych materiałów, ułatwiając projektowanie przyrządów półprzewodnikowych nowej generacji.

Omówienie zawartości pracy

Materiał stanowiący treść rozprawy doktorskiej Anny Korbeckiej został przedstawiony na 115 stronach w formie 4 rozdziałów, nie licząc podsumowania i trzech dodatków uzupełniających. Zamieszczono 61 rysunków, 4 tablice, spis skrótów oraz 124 pozycje bibliograficzne.

Rozdział pierwszy stanowi wprowadzenie do problematyki badań. W pierwszym podrozdziale omówione zostały podstawowe pojęcia dotyczące materiałów półprzewodnikowych, roli różnego rodzaju domieszek oraz defektów. Przedstawione zostały cztery najważniejsze metody hodowli kryształów półprzewodnikowych. Wśród nich jest metoda epitaksji z wiązek molekularnych (MBE), umożliwiającą wytwarzanie struktur planarnych typu studni kwantowych i supersieci. Opis uzupełniony jest rysunkami ilustrującym położenie granic pasma walencyjnego i przewodnictwa dla półprzewodników samoistnych, domieszkowanych oraz studni kwantowych pierwszego i drugiego typu. Drugi podrozdział poświęcony jest rozrzedzonym

półprzewodnikom magnetycznym. W trzecim podrozdziale zatytułowanym „Modelowanie” przedstawiono możliwości pakietu numerycznego *nextnano*³. Schemat obliczeniowy obejmuje rozwiązywanie równań Poissona i Schödingera, uzupełnionych równaniami dryfowo – dyfuzyjnymi. Do wyznaczania funkcji falowych wykorzystuje się metodę **k·p** i przybliżenie masy efektywnej. Dla heterostruktur funkcja falowa jest przedstawiona w postaci zawierającej funkcję obwiedni.

W ostatnim podrozdziale autorka uściśla wielozadaniowy cel i zakres swojej pracy. Konieczne jest, przede wszystkim, opracowanie istniejącej teorii w formie implementacji do pakietu *nextnano*³. Tak rozszerzony pakiet *nextnano*³ powinien umożliwić badanie realistycznych heterostruktur związków półprzewodnikowych grupy III-V, jak na przykład GaAs, AlGaAs, AlAs domieszkowanych jonami magnetycznymi Mn, jako nośnikami momentów magnetycznych, z możliwością modulowania magnetyzacji za pomocą zewnętrznego pola elektrycznego.

Rozdział drugi poświęcony został metodom teoretycznym wykorzystywanym w pakiecie *nextnano*³. Informacje o najbardziej znanych strukturach krystalicznych poprzedzają obszernie wprowadzenie do metody **k·p**. Podkreślone zostały zalety tej metody: możliwość posługiwania się małą liczbą stanów (6, 8 lub 14), możliwość uwzględnienia oddziaływania spin-orbita, naprężeń oraz oddziaływań wymiennych. W kolejnych trzech paragrafach drugiego podrozdziału przedstawiono szczegółowe hamiltoniany do wykorzystania w metodzie **k·p**, odpowiednio, dla trójwymiarowych kryształów o strukturze wurcytu, blendy cynkowej i heterostruktur. Dla tych ostatnich należy uwzględnić modyfikacje wynikające z zaburzenia periodyczności krystalicznej. Trzeci podrozdział zawiera opis podejścia Burta – Foremna, jako sposobu ominięcia pewnych słabości pomysłu pierwotnie wprowadzonego przez Luttingera i Kohna do metody **k·p**, który polegał na dość dowolnej symetryzacji hamiltonianu, mającej zapewnić jego hermitowskość. Podana została szczegółowa postać hamiltonianu **k·p** w podejściu Burta – Foremna dla materiałów o symetrii wurcytu, uwzględniająca 8 stanów. Wykorzystanie hamiltonianu Burta – Foremna do heterostruktur z zadaniem kierunkiem wzrostu wymaga zastosowania transformacji obrotu, przedstawionej w dodatku B do pracy.

W czwartym podrozdziale omówiono różne oddziaływania wieloelektronowe, prowadzące do pojawienia się ferromagnetyzmu. Wyróżniono jeden z mechanizmów oddziaływania zaproponowany pierwotnie przez Zenera w jego modelu magnetyzmu metali przejściowych, jako odpowiedni do opisu właściwości rozcieńczonych półprzewodników magnetycznych. Pokazano, jak w przybliżeniu pola średniego Curie-Weissa można otrzymać półfenomenologiczne równanie na temperaturę krytyczną fazy ferromagnetycznej, nazywanej temperaturą Curie. Podane zostały macierze hamiltonianu, opisującego oddziaływania magnetyczne, jako skutek wymiany typu p-d, w postaci nadającej się do wykorzystania w metodzie **k·p** z 6 stanami, zarówno dla struktury typu wurcytu, jak i blendy cynkowej. Przetestowano wpływ oddziaływań wymiennych p-d, po wprowadzaniu do pakietu *nextnano*³, na strukturę pasmową objętościowego GaAs oraz (GaMn)As z 5% zawartością manganu.

Piąty podrozdział drugiego rozdziału poświęcony został problematyce supersieci półprzewodnikowych, potraktowanej opisowo. Zwrócono uwagę na dwa sposoby tworzenia supersieci: przez domieszkowanie i przez tworzenie heterozłączy. Omówiono pojęcie minipasma, jako fizycznego skutku łamania symetrii translacyjnej

w określonym kierunku przez przestrzennie okresowe naruszenie jednorodności materiałowej. Jest to możliwe dzięki wykorzystaniu zaawansowanych technologicznie metod krystalizacji z precyzją sięgającą pojedynczych warstw atomowych.

Rozdział trzeci zawiera oryginalne wyniki obliczeń uzyskane dla struktury typu MOS nazwanej przez Autorkę, z pewną przesadą, strukturą tranzystora polowego (FET), z warstwą rozcieńczonego półprzewodnika magnetycznego (GaMn)As, pełniącego rolę kanału dla ewentualnego transportu spinowo uporządkowanych nośników ładunku.

Modelowana numerycznie struktura składa się z grubej warstwy izolatora (40 nm tlenku Al_2O_3), 3,5 nm warstwy (Ga,Mn)As tworzącej studnię i kanał struktury FET o koncentracji kationów Mn ($7 \pm 1\%$), następnie cienkiej warstwy GaAs, szerokiej bariery $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ i bufora z arsenku galu. Za pomocą programu *nextnano*³ wyznaczony został schemat energetyczny pasma walencyjnego i przewodnictwa bez przyłożonego napięcia (rys. 3.4, str. 54). Widoczny jest efekt przyszpilenia poziomu Fermiego wywołany stanami powierzchniowymi w GaAs. W osobnym paragrafie omówiona została rola stanów powierzchniowych. Przeprowadzono obliczenia gęstości dziur w funkcji napięcia przyłożonego do struktury MOS w przypadku, gdy uwzględniono obecność stanów powierzchniowych na styku tlenku i (Ga,Mn)As oraz przy ich braku (rys. 3.5, str. 56). Obecność stanów powierzchniowych została uwzględniona przez wprowadzenie cienkiej (1 nm) warstwy silnie domieszkowanego tlenku na typy n.

Kolejny paragraf zawiera opis metody wyznaczania temperatury Curie oraz namagnesowania. Warstwa (Ga,Mn)As jest na tyle gruba, że średnia droga swobodna nośników jest krótsza niż szerokość kanału, co usprawiedliwia zastosowanie klasycznego podejście z użyciem przybliżenia Thomasa – Fermiego. Ponieważ gęstość stanów powierzchniowych dla (Ga,Mn)As nie jest znana, koncentracja stanów powierzchniowych N_f oraz akceptorów N_A w (Ga,Mn)As zostały potraktowane jako parametry dopasowania do wyników doświadczalnych: wyliczone gęstości dziur $p(z)$ powinny odtwarzać zależności eksperymentalne dla temperatury Curie T_C i namagnesowania nasycenia m_{sat} jako funkcji napięcia przykładanego do struktury MOS, które nazwane zostało napięciem bramki V_G .

Autorka posługuje się wzorami otrzymanymi w pracach dotyczących zastosowania modelu Zenera do opisu rozcieńczonych półprzewodników magnetycznych. Wzór (3.1) ze str. 57 na temperaturę Curie dla warstwy (Ga,Mn)As, przy zadanym napięciu bramki V_G , wymagałby uzasadnienia, gdyż nie występuje w żadnej z wcześniej cytowanych prac. Zgodnie z tym wzorem temperatura Curie zależy w uwikłany sposób od gęstości dziur $p(z)$. Chcąc obliczyć temperaturę Curie jako funkcję przyłożonego napięcia bramki, należy przede wszystkim wyznaczyć zależną od położenia gęstość dziur $p(z)$. Rysunek 3.5 (str. 59) zawiera profile gęstości dziur dla różnych napięć V_G , otrzymane w przybliżeniu Thomasa – Fermiego, przy użyciu pakietu *nextnano*³. Wszechstronna analiza wyników obliczeń pokazuje, że zastosowany opis teoretyczny zmian namagnesowania wywołany zmianą gęstości dziur poprzez zmianę napięcia V_G badanej struktury MOS odtwarza z dobrą dokładnością wyniki pomiarów.

Przeprowadzone badania teoretyczne stanowią pochwałę wykorzystanej metody pola średniego z oddziaływaniami p-d do opisu własności magnetycznych oraz użytego przybliżenia Thomasa – Fermiego w konkretnym przypadku badanej struktury MOS.

Sukces przedstawionego modelu, mimo konieczności wprowadzenia dość zawiłej parametryzacji, wydaje się wynikać w dużej mierze ze szczęśliwie przyjętej grubości warstwy (Ga,Mn)As, która uzasadnia pominięcie efektów kwantowania przestrzennego.

Ostatni podrozdział trzeciego rozdziału przedstawia wyniki podejścia kwantowego do tej samej struktury MOS. W ramach modelu $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ z 6 stanami zbadano najpierw wpływ oddziaływania wymiennego p-d na stany elektronowe. Wyznaczono gęstość dziur w studni o szerokości 3 nm z szerokimi 20 nm barierami AlAs. Następnie przystąpiono do obliczeń dla struktury MOS. Zgodnie ze schematem pakietu *nextnano*³ wyznaczono potencjał elektrostatyczny oraz poziom Fermiego i strukturę elektronową przez rozwiązanie równania Poissona i Schrödingera. Otrzymane krzywe gęstości dziur różnią się od gęstości modelu Thomasa – Fermiego ilościowo i jakościowo. Rys. 3.13 (str. 65) pozwala porównać scałkowane gęstości dziur w przypadku kwantowym i „klasycznym” – zgodnym z modelem Thomasa - Fermiego – jako funkcje napięcia V_G przyłożonego do struktury. Widać wyraźną asymetrię zależności kwantowej, która nie występuje w przypadku klasycznym. Wyniki przedstawione rys. 3.15 (str. 66) pokazują, że zmiana efektywnej szerokości kanału w zakresie napięć przykładanych do struktury MOS wynosi zaledwie 0,11 nm, co kontrastuje z wynikiem klasycznym 1.15 nm – o rząd wielkości większym. Różnice w opisie kwantowym i klasycznym przenoszą się na zależność temperatury Curie od napięcia przyłożonego do struktury MOS, jak to pokazuje rys. 3.16 ze str. 67.

Opisane modelowanie zostało rozszerzone na przypadek struktury MOS z innym rozcieńczonym półprzewodnikiem magnetycznym (In,Mn)As jako kanałem. Obliczenia przeprowadzono dla dwóch różnych szerokości kanału: 3 nm oraz 5 nm. Wyznaczono i porównano temperatury Curie T_C w przypadku klasycznym i kwantowym dla różnych napięć V_G . Dla kanału o szerokości 5 nm znaleziono gęstości dziur w funkcji odległości. Widać duże różnice między przypadkiem klasycznym i kwantowym. W tym ostatnim przypadku można dostrzec efekty wnikania funkcji falowej poza obszar kanału i jej oscylacji w obszarze kanału.

W obu rozważanych przypadkach materiałowych struktury MOS pokazany został wpływ zewnętrznego pola elektrycznego na temperaturę Curie warstwy rozcieńczonego półprzewodnika magnetycznego, zarówno w podejściu klasycznym jak i kwantowym. Opisy te, chociaż podobne jakościowo, różnią się ilościowo. Tym nie mniej opis klasyczny wydaje się bardziej odpowiedni do opisu rzeczywistych struktur i lepiej odtwarza wyniki doświadczeń, przynajmniej w odniesieniu do (Ga,Mn)As.

Autorka zauważa ograniczoną stosowalność obecnego podejścia teoretycznego i wyraża pogląd, iż pełna teoria wpływu pola elektrycznego na temperaturę Curie warstw rozcieńczonych półprzewodników magnetycznych wymagałaby uwzględnienia efektów nieporządku i rozpraszania naruszającego zachowanie quasi-pędu, reprezentowanego przez $\mathbf{k}_{||}$. Można tu dodać, że również opis tworzenia się daleko zasięgowego uporządkowania ferromagnetycznego w półprzewodniku magnetycznym, oparty na założeniach modelu Zenera oddziaływań wymiennych p-d, jest uproszczeniem wymagającym rozważenia w świetle możliwości zastosowania innych zaawansowanych metod fizyki ciała stałego i fizyki statystycznej. Wszystko to wykracza jednak dość daleko poza cele obecnej pracy.

Ostatni podrozdział trzeciego rozdziału stanowi rozszerzenie wcześniejszych rozważań dla struktury MOS na przypadek dwóch supersieci zawierających warstwy (Ga,Mn)As o różnych grubościach 2,3 nm i 3,3 nm. Wyniki obliczeń zostały obszernie omówione i przejrzysto przedstawione na 3 rysunkach (3.20, 3.21, 3.22). Uwzględniono 6 stanów z możliwością włączenia oddziaływań p-d w ramach pakietu *nextnano*³. Wyliczono kształt wierzchołka pasma walencyjnego, kwadraty modułów funkcji falowych w funkcji położenia w strukturze, energie własne dla $\mathbf{k}=0$ i zależności dyspersyjne dla supersieci. Poza przypadkiem bez oddziaływań p-d, uwzględniono oddziaływania p-d z dwoma wartościami parametru rozszczepienia B_G : 0,01 i 0,03 eV. Porównano też strukturę poziomów energetycznych i funkcji falowych dla supersieci i pojedynczej studni odpowiadającej komórce podstawowej supersieci z warstwą (Ga,Mn)As o grubości 3,3 nm. Bardzo pouczające jest zestawienie obok siebie wyników obliczeń dla studni i supersieci, ukazujące wpływ oddziaływania p-d na stany kwantowe. Porównane zostały również wyliczone zależności dyspersyjne w kierunku $\mathbf{k}_{||}$.

Ostatni czwarty rozdział poświęcony jest modelowaniu niemagnetycznych struktur półprzewodnikowych z myślą o zastosowaniach w detektorach podczerwieni. Rozdział zawiera zastosowanie ulepszonej metody $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ polegającej na zastąpieniu w programie *nextnano*³ hamiltonianu Luttingera – Kohna przez hamiltonian Burta – Foremana, który nie prowadzi do pojawienia się niefizycznych stanów własnych.

W pierwszym podrozdziale rozpatrzono studnie GaAs i GaN o różnych szerokościach i różnych barierach. Porównano zależności dyspersyjne oraz funkcje falowe przy wykorzystaniu hamiltonianu Luttingera – Kohna i hamiltonianu Burta – Foremana. Zwracają uwagę większe różnice uzyskane w przypadku studni z GaN o strukturze wurcytu, gdy uwzględnione są odkształcenia.

Drugi podrozdział dotyczy modelowania struktur półprzewodnikowych, traktowanych zarówno jako supersieć lub też jako wielostudnia. Wykorzystano metodę $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ z 8 stanami do wyznaczenia funkcji falowych stanów elektronowych i dziurowych dla studni kwantowych GaSb (struktura blendy cynkowej) o szerokości 10 i 12 nm oraz dla supersieci utworzonych z tych samych studni kwantowych, przy barierach ze stopu $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$.

W dodatku C zdefiniowano współczynnik absorpcji dla promieniowania elektromagnetycznego. Przytoczony tam wzór pozwala wyliczyć współczynnik absorpcji fotonów o określonej polaryzacji, bez uwzględnienia efektów ekscytonowych, jeśli znane są stany elektronowe. Rysunek 4.6 zawiera porównawcze wykresy współczynnika absorpcji w funkcji energii fotonów dla studni oraz supersieci przy dwóch polaryzacjach TE i TM padającego promieniowania optycznego. We wszystkich przypadkach widać wyraźny wzrost absorpcji dla supersieci.

Rozpatrzono też strukturę warstwową GaAs/ $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ o jednakowych grubościach warstw 10 nm, jako studnię kwantową oraz jako supersieć. Wyznaczone zostały stany elektronowe i dziurowe dla studni oraz współczynnik absorpcji dla dwóch polaryzacji promieniowania. Zidentyfikowano ważniejsze możliwe przejścia międzypasmowe. Na rysunku 4.8 porównano współczynniki absorpcji dla studni i supersieci. Tak jak w poprzednim przypadku, współczynnik absorpcji dla supersieci jest o ok. 30% większy niż dla studni kwantowej. Kolejny rysunek 4.9 zawiera wykresy współczynnika absorpcji dla studni i supersieci przy pięciu różnych

grubościach warstwy GaAs z przedziału od 4 do 12 nm dla polaryzacji TE i TM. Widać systematyczne obniżanie się progu absorpcji ze wzrostem grubości warstwy GaAs. Ilościowy opis tej zmiany dla studni i supersieci przedstawia wykres z rysunku 4.9(c). Podrozdział kończą przykładowe obliczenia struktury elektronowej dla pojedynczej studni oraz wielostudni z 4 i 6 studniami, pokazujące w ilościowy sposób proces tworzenia się minipasm.

Ostatni podrozdział poświęcono badaniu struktur o dość niezwykłych własnościach, utworzonych z dwóch wąskoprzernych materiałów InAs i GaSb o strukturze krystalicznej typu blendy cynkowej i zbliżonych stałych sieciowych. Połączenie tych materiałów daje heterostrukturę z tak zwaną złamaną przerwą energetyczną: dno pasma przewodnictwa InAs znajduje się poniżej pasma walencyjnego GaSb. Złożoność problemu dobrze ilustruje rysunek 4.12, gdzie widać energie stanów elektronowych i dziurowych oraz kwadraty modułów funkcji falowych, ukazujących hybrydyzację, wyliczone dla warstwy InAs(15 nm)/GaSb(10 nm), umieszczonej między barierami z AlSb(10 nm).

Dalsze obliczenia dotyczą supersieci InAs(2.7 nm)/GaSb(3 nm). Widać segregację przestrzenną stanów elektronowych i dziurowych. Na rysunku 4.14 przedstawiono zależności dyspersyjne dla minipasm w postaci zależności energii od wektora k_z w kierunku wzrostu supersieci. Przeprowadzono obliczenia absorpcji międzypasmowej i wewnątrzpasmowej dla pasma przewodnictwa oraz pasma walencyjnego w funkcji energii padającego promieniowania.

Pokazano, jak mała zmiana grubości warstw InAs i GaSb, rzędu 2 nm, zmienia kolejność poziomów energetycznych zhybrydowanych stanów elektronowo-dziurowych. Osobne miejsce zajmuje dyskusja wpływu geometrii supersieci II typu utworzonej z InAs/GaSb na przerwę wzbronioną. Rachunki przeprowadzono dla dwóch grubości warstw InAs (6 i 18 warstw atomowych) i kilkunastu warstw GaSb (z przedziału od 3 do 20 warstw atomowych). Zgodnie z wykresami przedstawionymi na rysunku 4.18, największe zmiany przerwy wzbronionej występują dla cieńszej warstwy InAs, przy warstwach GaSb o grubościach nie przekraczających 10 warstw atomowych. Zmieniając grubość warstwy GaSb w supersieci InAs/GaSb można przesunąć krawędź absorpcji, co posiada dużą wartość praktyczną w detekcji podczerwieni. Energie przejść między różnymi stanami elektronowymi i dziurowym w odmienny sposób zależą od geometrii komórki elementarnej supersieci InAs/GaSb. Przeanalizowano przykładowo 4 energie przejść między stanami e_1 , e_2 , lh_1 , hh_1 , hh_2 dla grubości InAs od 6 do 40 warstw jednoatomowych przy ustalonej grubości 9 i 11 nm warstwy GaSb. Wyniki obliczeń zawiera rysunek 4.19 (str. 91). Widać tam, że najsilniej zmieniają się energie przejścia e_2-e_1 między dwoma pierwszymi stanami elektronowymi oraz energia hh_1-e_1 odpowiadająca przerwie energetycznej. Energia przejścia między pierwszym i drugim stanem ciężkich dziur pozostaje prawie niezależna od grubości warstwy InAs.

Ostatni problem rozpatrzony w pracy doktorskiej dotyczy, obserwowanego doświadczalnie, zjawiska mieszania się atomów indu i antymonu na międzypowierzchni InAs/GaSb. Modelowanie efektu dyfuzji antymonu do warstwy InAs zrealizowane zostało przez umieszczenie na międzypowierzchni warstwy stopu $InAs_xSb_{(1-x)}$. Obliczenia zostały wykonane dla supersieci o wcześniej wykorzystywanej komórce InAs(2.7 nm)/GaSb(3 nm). Rozpatrzono cztery przypadki: brak dyfuzji,

dyfuzja lewostronna, prawostronna i obustronna. Uzyskane krzywe absorpcji wykazują znaczne różnice w kształcie i rozmieszczeniu pików. Różnica w krawędzi absorpcji sięga 0,1 eV.

Uwagi krytyczne

Z obowiązku recenzenta, chciałbym zwrócić uwagę na pewne niedostatki natury językowej oraz pytania, jaki nasunęły się podczas lektury pracy. Nie wpływają one na ogólną wartość i ocenę pracy doktorskiej. Na samym początku, z uznaniem należy zauważyć staranność w redagowaniu tekstu i stosunkowo nieliczne, łatwe do wykrycia błędy literowe, wyszczególnione w załączniku. Praca zaopatrzona jest w spis używanych symboli; szkoda, że zabrakło w nim objaśnień wielu parametrów, jak na przykład: N_0 , M , M_i , x_i , x_1 itp. Kolejność cytowania w tekście literatury nie odpowiada ich numeracji. Bardziej wygodny dla czytelnika byłby alfabetyczny lub tematyczny spis literatury.

Trudno pochwalać używanie nazwy „envelopa” dla funkcji mającej polski odpowiednik „obwiednia”. Czasownik *opierać się*, którego imiesłowem jest, chętnie wykorzystywany w pracy, wyraz *oparty* z przyimkiem *o* lub *na*, powinien być prawidłowo używany w zależności od znaczenia, w jakim występuje. Jest prosta reguła dotycząca przyimka *o*, że powinien on poprzedzać nazwę przedmiotu. Przestrzeganie tej reguły uchroniłoby tekst pracy od wielu usterek językowych.

Zwykle wykreśla się kwadraty *modułów* funkcji falowych. Autorka pracy pisze wyłącznie o kwadratach funkcji falowych. Jeśli nie jest to niedopatrzenie, wymaga wyjaśnienia. Z punktu widzenia użyteczności proponowanej metody, chciałoby się wiedzieć:

- Jakie są wymagania sprzętowe i czasy wykonywania poszczególnych obliczeń?
- Ile parametrów zewnętrznych potrzeba do uruchomienia programów obliczeniowych?
- Czy możliwe jest wystąpienie antyferromagnetyzmu w badanej warstwie (Ga,Mn)As w ramach modelu oddziaływań p-d?

Wnioski końcowe

Trzy pierwsze rozdziały pracy stanowią część opisową i wprowadzenie do problematyki badań. Pewien niedosyt budzi brak odwołania się do podstawowych podręczników teorii ciała stałego, co ułatwiłoby lepsze umotywowanie i osadzenie metody **k·p** wśród innych metod wyznaczania struktury pasmowej. Cytat do podręcznika fizyki przyrządów półprzewodnikowych autorstwa Sze (S.M. Sze, Kwok K. Ng, „Physics of Semiconductor Devices”, Third Ed., Wiley – Interscience 2007), mógłby dostarczyć wielu argumentów praktycznych przemawiających za celowością rozwijanych w pracy badań. Sądząc po tytule pracy, można by też oczekiwać odniesienia do literatury zawierającej podstawy teorii magnetyzmu ciał stałych. W pracy zachowane są właściwe proporcje między częścią ogólną i częścią poświęconą prezentacji wyników badań własnych, zawartych w dwóch kolejnych rozdziałach.

Biorąc pod uwagę całokształt obecnej pracy doktorskiej uważam, że doprowadziła ona do powstania nowego, wartościowego narzędzia obliczeniowego, które umożliwia modelowanie heterostruktur półprzewodnikowych z wykorzystaniem materiałów grupy III-V, w szczególności GaAs z domieszką magnetyczną Mn oraz InAs i GaSb. Autorka posłużyła się znanym programem *nextnano*³, gdzie moduł wykorzystujący metodę **k·p** z sześcioma i ośmioma stanami został rozbudowany poprzez

- (i) włączenie oddziaływania p-d oraz
- (ii) zastąpienie hamiltonianu Luttingera – Kohna ogólniejszym hamiltonianem Burta – Foremana.

Obie modyfikacje programu *nextnano*³ zostały starannie przetestowane dla materiałów objętościowych, studni kwantowych i supersieci. Przedstawione w pracy obszerne wyniki obliczeń są zgodnie z wcześniejszymi przewidywaniami teoretycznymi i doświadczalnymi właściwości magnetycznych i optycznych badanych struktur w różnych konfiguracjach materiałowych. Jest to zasadnicze osiągnięcie pracy doktorskiej i sukces zaproponowanej metody obliczeniowej.

Wartością samą w sobie jest bogata treść fizyczna uzyskanych wyników.

- ✓ Pokazano, jak napięcie, przyłożone do struktury MOS z warstwą GaAs domieszkowaną manganem, daje możliwość sterowania fazą ferromagnetyczną jonów manganu poprzez zmianę koncentracji dziur. Ujawniono niekorzystny wpływ stanów powierzchniowych, co pozwala na wysnucie użytecznych wniosków dotyczących efektywnej realizacji kanału transportu spinowo spolaryzowanych nośników ładunku.
- ✓ Zbadano możliwość kontroli krawędzi absorpcji promieniowania optycznego w supersieci InAs/GaAs poprzez zmianę grubości warstw materiałów składowych, co ma duże znaczenie w detekcji podczerwieni.

Podsumowując stwierdzam, że zamysł badań podjętych przez mgr Annę Korbecką został w pełni zrealizowany. Biorąc pod uwagę całokształt wyników przedstawionych w pracy, jak i formę ich prezentacji, uważam, że przedstawiona praca spełnia w zupełności wszystkie wymagania stawiane rozprawom doktorskim w świetle obowiązującej Ustawy o Stopniach Naukowych i Tytule Naukowym z roku 2003 wraz z późniejszymi zmianami. Wnioskuje o dopuszczenie mgr Anny Korbeckiej do dalszego postępowania, mającego na celu nadanie jej stopnia naukowego doktora nauk fizycznych.

Leszek Adamowicz

Spis zauważonych błędów

1. Str. 24, wzór (2.20): brak znaku +; inaczej hamiltonian staje się czwartego stopnia.
2. Str. 26, wzór (2.25), wyraz z czwartej kolumny macierzy i piątego wiersza: powinien być znak „-”
3. Str. 27, wzór (2.30): brak kilku znaków *ket*.
4. Str. 31, środek: brak znaku „-” przy zastąpieniu składowej k_α wektora $\mathbf{k}$ operatorem.
5. Str. 51, początek podrozdziału 3.1: powinno być *ferromagnetycznymi*.
6. Str. 64, środek: powinno być *we wspomnianym* zamiast *we wspomnianych*.
7. Str. 70, rys. 3.20: Rozbieżność w wartościach B_G na rysunkach i w podpisie.
8. Str. 91, rys. 4.19: w napisie na panelu (a) powinno być 9 nm zamiast 11 nm.
9. Str. 102, wzór (B.3): po lewej stronie równości powinno być k_α zamiast k'_α .
10. Str. 106, wzory (C.7) i (C.8): powinna tam występować część urojona χ^2_{ij} podatności dielektrycznej.
11. Str. 112, pozycja literatury [74] C. Zener: powinien być rok (1951) zamiast (1950).