

Prof. dr hab. Ryszard Buczek
Instytut Fizyki PAN, Warszawa

30 maja 2017r

Recenzja pracy doktorskiej mgr Agnieszki Twardowskiej „Transport przez barierę AIAs z udziałem stanów związanych z punktami X”

Rozprawa doktorska pani mgr. Agnieszki Twardowskiej poświęcona jest badaniom transportu poprzez półprzewodnikowe struktury warstwowe. Struktury takie są szeroko stosowane w różnych układach elektronicznych dzięki możliwości konstruowania studni jak i barier potencjału o zadanych parametrach oraz możliwości sterowania ich własnościami przy użyciu zewnętrznych potencjałów. Z tego też powodu są one często obiektami badań zarówno doświadczalnych jak i teoretycznych. Rozprawa pani mgr. Twardowskiej ma charakter teoretyczny i dotyczy bardzo ciekawego problemu tunelowania poprzez strukturę zawierającą, w środkowej swej części, zarówno barierę energetyczną jak i studnię potencjału w zależności od poprzecznego wektora falowego elektronu. Jest to struktura zbudowana z półprzewodników III-V GaAs/AlAs/GaAs. W związku z tym, że minimum pasma przewodnictwa w objętościowym kryształ GaAs znajduje się w innym punkcie strefy Brillouina niż w AIAs, to w trakcie transportu koherentnego elektrony napotykają zarówno barierę w punkcie Gamma jak i studnię w punkcie X. Z powodu tej różnicy, do badania transportu, niezbyt przydatne okazuje się często stosowane narzędzie jakim jest metoda masy efektywnej. Pani Twardowska wybrała inną metodę. Jest to metoda nierównowagowych funkcji Greena w ramach przybliżenia ciasnego wiązania. W używanym opisie uwzględnione są orbitale s, p, d oraz s* oraz elementy macierzowe pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Badany jest jedynie transport koherentny bez uwzględnienia oddziaływań spinowych. Pani Twardowska bada zarówno transport poprzez strukturę zbudowaną w kierunku krystalograficznym [001] jak i w kierunku [111]. Bada też wpływ na transport domieszkowania warstwy AIAs przy atomami krzemu. Tworzą one domieszki donorowe podstawiając atomy aluminium.

Rozprawa składa się z pięciu rozdziałów. Po ogólnym wstępie autorka w rozdziale pierwszym daje dość szczegółowe wprowadzenie do metody nierównowagowych funkcji Greena w zastosowaniu do układów jednowymiarowych. Metoda ta oparta jest na formalizmie Kiełdysza-Bayma-Kadanowa i stosowana do opisu układów w warunkach braku równowagi termodynamicznej z jakimi zawsze mamy do czynienia w transporcie, gdy wartości elektronowych potencjałów chemicznych emitery i kolektora są różne.

Następne rozdziały dotyczą szczegółów zastosowania tej metody do badanych struktur GaAs/AlAs/GaAs. Autorka w sposób przejrzysty przedstawia elektronowe struktury pasmowe kryształów objętościowych obu półprzewodników. W przypadku struktur warstwowych opartych o te materiały, stosuje ona periodyczne warunki brzegowe w kierunkach prostopadłych do kierunku wzrostu struktury. Ma to uzasadnienie w związku z zazwyczaj makroskopowymi wymiarami układów w tych kierunkach. Pokazuje jak dla różnych poprzecznych wektorów falowych tworzy się bariera oraz studnia potencjału. Omawia też warunki jakie powinny zaistnieć dla tunelowania rezonansowego poprzez barierę. Zależą one zarówno od grubości środkowej warstwy jak i od pola elektrycznego w tym obszarze. W dalszej części pani Twardowska dyskutuje wpływ domieszek w obszarze AIAs na istnienie dodatkowych rezonansów. Dyskutuje także możliwość tunelowania poprzez boczne minima

w X przy braku warunków rezonansu. Ten kawałek rozprawy uważam za dosyć kontrowersyjny. Wróć do jego omówienia w dalszej części recenzji.

Pani Twardowska w rozdziale drugim przedstawia sposób w jaki obliczała potrzebne elementy funkcji Greena dla wszystkich obszarów. Najpierw tak zwane energie własne dla jednorodnych obszarów elektrod. Następnie wyprowadza metodę rekurencyjną jaką użyła dla obliczenia funkcji Greena w obszarze centralnym. Obecność pojedynczych domieszek łamie symetrię translacyjną. Autorka wprowadza elementy macierzowe odpowiedzialne za rozpraszanie na pojedynczych domieszkach i omawia sposób uśredniania po układzie domieszek. Uśrednienie przywraca możliwość opisu tunelowania jako procesu koherentnego, bez zmiany poprzecznego wektora falowego.

Rozdziały od 3 do 5 zawierają opis wyników przeprowadzonych obliczeń dla dwu różnych kierunków wzrostu jak i dla struktury zorientowanej w kierunku [001] z domieszkami w środkowym obszarze. Autorka oblicza zarówno gęstości spektralne w poszczególnych rejonach struktur jak i zależne od natężenia pola gęstości prądu. Wyniki przedstawiane są dla kilku różnych grubości warstwy AlAs. Analiza wyników pozwala na identyfikację poszczególnych kanałów przewodnictwa jako odpowiednich rezonansów w strukturze.

Zastrzeżenia i uwagi:

Praca napisana jest w sposób przejrzysty i odpowiednio zilustrowana schematami struktur pasmowych, otrzymanymi gęstościami spektralnymi stanów oraz gęstościami prądu. Znalazłem nieliczne błędy typograficzne takie jak znaki zapytania zamiast numerów rysunków powstałe zapewne w trakcie wydruku pracy. Także przejęzyczenia jak np. „bloki dziesięciowymiarowe” zamiast „bloki o wymiarach 10×10 ”. Przy prezentowaniu struktur pasmowych na rysunkach 2.1 i 2.2 przydałyby się też wyjaśnienie jak zostały one wyznaczone. Domyślam się, że przy pomocy metody ciasnego wiązania i parametryzacji omawianej kilka stron dalej. Te drobne niedoskonałości pracy nie utrudniają lektury. W jej trakcie napotkałem jednak trudności w zrozumieniu jak naprawdę zdefiniowane są elektrody. Problem ten omawiany jest w rozdziale 2. Nie jest jasne czy lewa elektroda to to samo co emiter czy jednak jest to obszar jednorodny przed emitorem. W każdym razie potrzebne do opisu transportu elementy funkcji Greena odpowiadające elektrodom liczone są tak jakby to był obszar jednorodny. Jeśli tak, to jakie znaczenie ma dokładne wyliczanie elementów macierzowych funkcji Greena dla lewej elektrody jeśli energie stanów leżą powyżej poziomu Fermiego i stany te są nie obsadzone. Tak przynajmniej wynika ze schematów przedstawionych na rysunkach 2.6, 2.8 czy też 2.13. Jeśli jednak jest inaczej i elektrody są metaliczne, to powinno to być precyzyjnie objaśnione.

W pracy autorka twierdzi, że liczy transport koherentny. Zakłada jednak, że niezależnie od struktury energetycznej elektrody wszystkie stany w obszarze emitera są wypełnione zgodnie ze statystyką Fermiego Diraca. Jeśli jednak elektroda odpowiada jednorodnej warstwie GaAs z nieobsadzonymi stanami pasma przewodnictwa, to pojawia się pytanie skąd w ogóle wzięły się elektrony w elektrodzie. Jeśli elektroda odpowiada jednorodnej warstwie GaAs z uwzględnioną i w jakiś sposób uśrednioną obecnością domieszek donorowych, to pojawiają się następne pytania. Dlaczego koherentny proces tunelowania z obszaru domieszkowego do obszaru emitera poprzez ekranującą dodatnią barierę nie ma wpływu na transport (w każdym razie taki proces nie został w pracy opisany)? W jaki sposób

w trakcie transportu balistycznego w obszarze emitera obsadzone zostały wszystkie stany poniżej poziomu Fermiego, jeśli nie uwzględniane są zjawiska dyssypacji energii?

Nie jest jasne czy tunelowanie liczone jest przez całą strukturę pomiędzy elektrodami czy tylko poprzez barierę. Z jednej strony pani Twardowska liczy skrajne elementy funkcji Greena i energie własne dla elektrod tak jakby były one obszarami jednorodnymi, z drugiej jednak zakłada całkowite obsadzenie wszystkich stanów elektronowych w obszarze emitera (który nie jest jednorodny) o energiach leżących poniżej poziomu Fermiego. Z jednej więc strony pisze o obliczaniu transportu poprzez strukturę warstwową, z drugiej, jednak transport poprzez warstwę emitera wydaje się nie mieć znaczenia. Liczy się jedynie struktura stanów w emiterze całkowicie obsadzonych poniżej poziomu Fermiego.

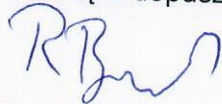
Tutaj pojawia się też automatycznie problem opisu procesów dekoherencji, które muszą występować przy tunelowaniu w kierunku [111] poprzez boczne minima. Ponieważ dyspersja stanów emitera nie przecina się w żadnym punkcie $k_{\text{prostokątne}}$ z gęstością spektralną elektronów w obszarze AIAs, do tego aby zaszło tunelowanie musi nastąpić zmiana wartości wektora falowego z okolic punktu Gamma do okolic bocznych minimów w M_{bar} . W obliczeniach tego typu procesy nie są uwzględnione. Ponieważ jednak gęstość spektralna stanów elektronowych zlokalizowanych w studniach pod bocznymi minimami wnika nieznacznie w obszar ostatnich warstw atomowych emitera, autorka przyjęła założenie, że jest ona automatycznie dostępna dla elektronów w emiterze, bez względu na procesy dekoherencji jakie musiałyby towarzyszyć zmianie wektora falowego aby te stany obsadzić. Rozumiem, że tego typu założenie musiało być poczynione z powodów konieczności upraszczania modelu ze względu na możliwości obliczeniowe. Wydaje mi się jednak, że prowadzi to do pewnej sprzeczności. Równie dobrze można by było np. uwzględnić zmianę wektora falowego w pierwszych warstwach warstwy AIAs związaną z niezerową gęstością wnিকającą do bariery od obsadzonych stanów w emiterze. Jednak taki proces jest wykluczony. Założono w pracy bardzo szybką relaksację w emiterze z możliwym udziałem fononów o odpowiednim pędzie poprzecznym, za to brak jakiegokolwiek relaksacji pędu w obszarze bariery.

W obszarze emitera autorka samo-uzgadnia gęstość ładunku i kształt potencjału. Nie robi tego jednak dla obszaru AIAs dla studni dla wektorów falowych bliskich M_{bar} . Autorka zakłada, że czas przebywania elektronów w tym obszarze jest znacznie krótszy niż w obszarze emitera. Nie jest to dla mnie oczywiste. Myślę, że pomogłoby tu pokazanie struktury energetycznej stanów bocznych studni na tle gęstości spektralnej zrzutowanej na pierwsze warstwy atomowe kolektora, lub jakiś bardziej dokładny rachunek, aby przekonać się czy na pewno opróżnianie studni nie wymaga uwzględnienia procesów dekoherencji związanych z koniecznością zmiany poprzecznej składowej wektora falowego.

Podsumowując, autorka pracy doktorskiej opracowała oryginalny model opisujący transport przez złożoną wielowarstwową strukturę półprzewodnikową GaAs/AIAs/GaAs. Model oparty na formalizmie nierównowagowych funkcji Greena można łatwo zastosować do podobnych układów zbudowanych z innych materiałów. Jedną z zalet opracowanego modelu jest możliwość badania transportu w układach składających się z warstw posiadających minimum pasma przewodnictwa w różnych punktach strefy Brillouina. W wyniku przeprowadzonych obliczeń otrzymano realistyczne charakterystyki prądowo-napięciowe o schodkowym kształcie. Porównanie ich z wynikami pomiarów oraz możliwość analizy otrzymanych

gęstości spektralnych umożliwia identyfikację poszczególnych kanałów transportu obserwowanych w doświadczeniach.

Pomimo omawianych przeze mnie pewnych niejasności w opisie stosowanego modelu uważam pracę doktorską pani mgr Agnieszki Twardowskiej za ciekawą i merytorycznie bardzo dobrą. Uważam że spełnia ona wszelkie kryteria stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie mgr Agnieszki Twardowskiej do publicznej jej obrony.



Ryszard Buczko