

Prof. dr hab. Włodzimierz Jaskólski
Instytut Fizyki
Uniwersytet Mikołaja Kopernika
w Toruniu

Dziekanat Wydziału Fizyki UW
Sekcja ds. pracowniczych
Wpłynęło dn. 19.04.2016
podpis

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Agnieszki Twardowskiej
„Transport przez barierę AIAs z udziałem stanów związanych z punktem X”**

Tunelowanie elektronów przez bariery potencjału, wytworzone w warstwowych układach półprzewodnikowych, jest problemem znanym i badanym niemalże od półwiecza, a zjawisko rezonansowego tunelowania przez układy warstwowe i supersieci znalazło już szereg praktycznych zastosowań. Proste, jednowymiarowe modele pozwalają jedynie na jakościowy opis transportu w takich strukturach. Metody bardziej zaawansowane pozwalają uwzględniać realistyczną, trójwymiarową strukturę półprzewodników oraz oddziaływania pomiędzy elektronami, a także efekty fononowe. Jedną z takich metod jest metoda nierównowagowych funkcji Greena, zastosowana przez autorkę rozprawy do badania procesów transportu w układach warstwowych GaAs/AIAs/GaAs. Wybór tego konkretnego układu nie jest przypadkowy, był on intensywnie badany eksperymentalnie w latach dziewięćdziesiątych a także całkiem niedawno w konfiguracji zawierającej domieszki w cienkiej warstwie arsenku glinu. Ale jest to układ interesujący także z czysto teoretycznego punktu widzenia: GaAs jest półprzewodnikiem o prostej przerwie energii wzbronionych podczas gdy AIAs posiada skośną przerwę energetyczną, co skutkuje tym, że w punkcie Γ strefy Brillouina AIAs stanowi dla elektronów z pasma przewodnictwa GaAs barierę, a w punkcie X – studnię potencjału. W zależności od kierunku wzrostu warstw, niektóre punkty X mogą leżeć, lub nie, na kierunku wektora falowego odpowiadającego propagacji wzdłuż kierunku wzrostu, co prowadzi do różnych mechanizmów rezonansowego tunelowania, przy zachowaniu prostopadłej składowej wektora falowego. Mechanizmy te nie były jak dotąd szczegółowo zbadane. Dlatego uważam, że podjęcie tej tematyki przez doktorantkę było bardzo celowe, tym bardziej, że uzyskane rezultaty są interesujące, a rozwinięty w rozprawie formalizm pozwoli na dalsze studia w tej dziedzinie dla innych podobnych układów oraz z włączeniem dodatkowych efektów.

Oprócz bardzo krótkiego wstępu, rozprawa zawiera dwa rozdziały poświęcone opisowi procesów tunelowania w oparciu o formalizm nierównowagowych funkcji Greena i trzy rozdziały poświęcone głównie prezentacji otrzymanych wyników. W rozdziale pierwszym autorka prezentuje znane podstawy formalizmu opisującego tunelowanie w przypadku jednowymiarowym. W rozdziale drugim dokonuje rozszerzenia tego formalizmu na realistyczne trójwymiarowe układy półprzewodnikowe takie jak GaAs/AIAs/GaAs. Najpierw w bardzo przystępny i klarowny sposób prezentuje strukturę energetyczną składowych półprzewodników,

schematy energetyczny pasma przewodnictwa w funkcji przyłożonego zewnętrznego pola elektrycznego i dla różnych punktów X , a także analizuje przypadek domieszkowanej studni AlAs. W dalszej części szczegółowo wyprowadza wszystkie elementy potrzebne do obliczania gęstości spektralnych i prądów tunelowania: pokazuje w jaki sposób buduje elementy macierzowe hamiltonianu i funkcji Greena w modelu ciasnego wiązania, także dla układu z domieszką. Ta część rozprawy dowodzi dużej biegłości doktorantki w posługiwaniu się zaawansowanym aparatem matematycznym formalizmu nierównowagowych funkcji Greena.

Rozdział trzeci poświęcony jest analizie prądów tunelowania dla przypadku układu warstwowego, którego kierunek wzrostu określony jest przez wektor $[001]$. Autorka najpierw analizuje geometrię warstw prostopadłych do kierunku wzrostu. Następnie oblicza kształt samouzgodnionych potencjałów (tzn. den pasm przewodnictwa w punktach Γ i X) dla struktury z donorowo domieszkowaną warstwą emitera (w pewnej odległości od międzypowierzchni GaAs/AlAs) umieszczonej w polu elektrycznym równoległym do kierunku wzrostu warstw. Następnie przechodzi do obliczania poziomów energetycznych E (gęstości spektralnych) w obszarze trójkątnej studni kwantowej emitera oraz w obszarze warstwy AlAs dla różnych jej szerokości oraz w funkcji natężenia pola elektrycznego. Autorka analizuje schodkowe struktury na wykresach gęstości prądu w funkcji natężenia pola i pokazuje, że odpowiadają one miejscom krzyżowania się parabol $E(k_{\perp})$ dla dyskretnych poziomów energetycznych (podpasm) w studni emitera i w warstwie AlAs. Tym samym, precyzyjnie potrafi określić charakter dyskretnych poziomów, między którymi następuje rezonansowe tunelowanie nośników.

W rozdziale czwartym podobne obliczenia przeprowadzone są dla struktury GaAs/AlAs/GaAs z kierunkiem wzrostu $[111]$. Jednak w tym przypadku minima podpasm $E(k_{\perp})$ w warstwie AlAs nie występują dla tej samej wartości $k_{\perp}$, dla którego minimum mają podpasma w trójkątnej studni emitera ($k_{\perp}=0$). W rezultacie nawet dla bardzo silnych pól nie obserwuje się przecinania parabol poniżej poziomu Fermiego i nie zachodzi ściśle rezonansowe tunelowanie. Pomimo tego, wykresy gęstości prądu tunelowania w funkcji natężenia pola elektrycznego także zawierają pewne struktury schodkowe, podobnie jak to miało miejsce w przypadku rezonansowego tunelowania w kierunku $[001]$. Autorka proponuje wyjaśnienie tego zjawiska efektem wnikania funkcji falowych odpowiadającym dyskretnym poziomom w warstwie AlAs, o energiach poniżej poziomu Fermiego, do obszaru emitera i bardzo szybką relaksacją pędową elektronów wstrzykiwanych do tego obszaru z rezerwuaru n-GaAs. Pojawia się jednak pytanie czym jest taki proces szybkiej relaksacji pędowej – oddziaływaniem z fononami w obszarze emitera? Jeśli tak, to różnica w porównaniu z dotychczasowymi interpretacjami pojawiania się takich schodkowych struktur na wykresach gęstości prądu tunelowania – jako efektów oddziaływania z fononami w obszarze warstwy AlAs – polegałaby na wskazaniu innego obszaru dla takiego oddziaływania. Interpretację autorki uważam za nowatorską i wiarygodną, tym bardziej, że opiera ją ona na wynikach obliczeń gęstości spektralnych w obu

obszarach, oraz analizą gęstości prądu tunelowania z rozkładem na całkowania po $k_{\perp}$ wokół różnych punktów ekstremalnych dwuwymiarowej BZ. Wyniki obliczeń rzeczywiście pokazują, że dla energii, dla których w warstwie AlAs pojawiają się dyskretne poziomy energetyczne E_i poniżej poziomu Fermiego, gęstość spektralna w obszarze bariery nie ma „własnych” maksimów, a te które się pojawiają, są małe, występują dokładnie dla tych samych energii i zwiększają swoje wartości ze wzrostem E_i (czyli z coraz większym wnikaniem funkcji falowej w obszar emitera). Najbardziej zaskakujący rezultat pojawia się na końcu tego rozdziału, gdzie porównano gęstości prądów tunelowania dla obu kierunków ([001] i [111]). Okazuje się, że dla niektórych szerokości warstwy AlAs, gęstość prądu tunelowania w kierunku [111] przewyższa, dla słabych pól, gęstość prądu w kierunku [001]. Wynik ten, na pierwszy rzut oka nieoczywisty, potwierdza jednak naszą wiedzę o tunelowaniu ściśle rezonansowym – daje ono istotny wkład do prądu tylko dla energii rezonansowych, podczas gdy całkowita wartość prądu tunelowania rośnie w miarę pojawiania się nowych, nierezonansowych lub nie w pełni rezonansowych kanałów transportu. W tym miejscu rozprawy odczuwam jednak pewien niedosyt ze względu na dosyć powierzchowne wyjaśnienie tego efektu. Boczne punkty X (a tym samym odpowiadające im studnie w AlAs i zlokalizowane w nich poziomy energetyczne) są przecież obecne także w przypadku tunelowania w kierunku [001], dlaczego zatem w tym przypadku słabiej „dokładają się” one do zwiększania prądu tunelowania, w reżimie silnych pól? Warto byłoby też odpowiedzieć na pytanie dlaczego dla słabych pól gęstość prądu tunelowania w kierunku [001] jest o kilka rzędów większa od gęstości prądu płynącego w kierunku [111] (rysunki 4.16-4.18).

Ostatni rozdział poświęcony jest badaniu prądów tunelowania w układzie zawierającym domieszki w warstwie AlAs. Obliczenia i analiza przeprowadzone są dla kierunku [001] wzrostu warstw epitaksjalnych. Domieszki reprezentowane są przez potencjał o geometrii sferycznej, prostokątnej studni. Autorka szczegółowo wyjaśnia jak i dlaczego zmienia się gęstość prądu tunelowania (w funkcji natężenia pola elektrycznego) w układzie zawierającym domieszki w porównaniu do układu niedomieszkowanego. Bada też energie wiązania domieszek zarówno w funkcji ich położenia oraz szerokości warstwy AlAs. Podoba mi się wyjaśnienie obserwowanego rozszczepienia gęstości spektralnej obliczonej w punkcie $\bar{M}$ dwuwymiarowej strefy Brillouina, jako związanego z mieszaniem stanów pochodzących od bocznych punktów X. Co do rezultatów prezentowanych w tym rozdziale mam jednak kilka pytań, na które warto, żeby autorka udzieliła odpowiedzi. 1) Poprawka do gęstości spektralnej związana z obecnością domieszki, prezentowana na rysunkach 5.1 i 5.2, zmienia znak dla energii odpowiadających dyskretnym poziomom energetycznym w AlAs; dlaczego ma właśnie taki profil? 2) Dlaczego wysokości maksimów gęstości spektralnej układu bez domieszki, prezentowane na rysunku 5.1 dla pola elektrycznego o natężeniu $E=110$ kV/cm, nie zgadzają się z tymi prezentowanymi na dolnym panelu rysunku 3.10? Pytanie o charakterze merytorycznym mam też do pozostałej części rozprawy. 3) W rozdziale 3.4, na str. 73 znajdujemy stwierdzenie, że „tunelowanie przez boczne punkty X nie odgrywa żadnej roli gdy prąd płynie w

kierunku [001]". Dlaczego więc odgrywa dominującą rolę dla prądu płynącego w kierunku [111]; przecież dla kierunku Γ -L wszystkie punkty X są „boczne”.

Rozprawa zawiera też szereg niedociągnięć i błędów redakcyjnych. Z recenzenckiego obowiązku wymienię kilka z nich. Nie podoba mi się często używane żargonowe określenie „tunelowanie przez stany związane z minimum pasma przewodnictwa w punkcie X leżącym na osi układu”. Punkt X należy do przestrzeni odwrotnej a tunelowanie odbywa się w przestrzeni rzeczywistej, zatem punkt X nie może leżeć na osi układu. Poprawne sformułowanie powinno brzmieć: „...w punkcie X leżącym na kierunku wektora falowego, który odpowiada propagacji wzdłuż kierunku wzrostu”. Na str. 21 pojawia się odnośnik do pracy [37?] a w Bibliografii w tym miejscu występuje pozycja [48]. Pod równaniem 1.1 wypadałoby napisać, że parametr t to czas. W podpisie pod rysunkiem 2.1 warto byłoby zaznaczyć, że $E=0$ zostało przyjęte w szczycie pasma walencyjnego, a skala energii bardzo przydałaby się na wykresach z rysunku 2.2. Na rysunku 2.11 warto byłoby dorysować parabolę odpowiadającą kolejnemu stanowi dyskretnemu w warstwie AIAs, co już w tym miejscu sygnalizowałoby możliwość wystąpienia krzyżowań parabol uwidoczniionych później na rysunkach gęstości spektralnych ze stron 78 i 79. Na str. 40, w drugim od dołu równaniu, brak jest po prawej stronie Diracowskiego symbolu całki (iloczynu skalarowego). Na str. 86 zamiast „minipasm” powinno być „podpasm”. Na str. 97 mamy odwołanie do rysunku (??). W podpisie rysunku 5.1 na str. 107 warto byłoby zaznaczyć, że dotyczy warstwy AIAs o szerokości $100\text{\AA}$. Zarówno w tekście rozdziału 5.2 (str. 109) jak i na rysunkach 5.3 i 5.4 (str. 110 i 111) brak jest informacji czego dotyczy „pierwszy” i „drugi” poziom.

Te drobne uwagi redakcyjne w żadnym istotnym stopniu nie umniejszają mojej bardzo pozytywnej opinii o rozprawie doktorskiej pani mgr Agnieszki Twardowskiej. Doktorantka postawiła sobie ambitny cel zbudowania modelu teoretycznego do obliczeń procesów tunelowania w trójwymiarowych, półprzewodnikowych układach warstwowych, w oparciu o formalizm nierównowagowych funkcji Greena i metodę ciasnego wiązania. Cel ten zrealizowała wykazując się biegłością w posługiwaniu się zaawansowanym aparatem matematycznym teorii ciała stałego. Bazując na tym modelu wykonała szereg obliczeń numerycznych dla realistycznych struktur GaAs/AIAs/GaAs w zewnętrznym polu elektrycznym, także dla przypadku struktur domieszkowanych, dowodząc przy tym bardzo dobrego opanowania metod numerycznych i technik obliczeniowych. Realizując swoje badania uzyskała szereg nowych i interesujących rezultatów. Stwierdzam, że rozprawa spełnia warunki stawiane pracom doktorskim w art.13. Ustawy o Stopniach i Tytule Naukowym i wnoszę o dopuszczenie doktorantki do publicznej obrony.

Toruń, 13-04-2016