

Teoria i modelowanie struktur półprzewodnikowych z modulowaną magnetyzacją

Niniejsza praca doktorska została poświęcona modelowaniu oraz analizie struktur półprzewodnikowych, również tych z modulowaną magnetyzacją. Zastosowany schemat obliczeniowy umożliwiający realistyczne modelowanie szerokiej grupy struktur półprzewodnikowych został oparty o metody ciągłe (tzn. opisujące strukturę jako złożenie różnych materiałów półprzewodnikowych o zadanych własnościach), zarówno w podejściu kwantowo-mechanicznym, jak również w semi-klasycznym podejściu Thomasa-Fermiego. Wykorzystany w przedstawionej rozprawie schemat obliczeniowy oparty jest na istniejącym pakiecie numerycznym nextnano³ rozszerzonym dodatkowo o trzy niezwykle istotne elementy, które zostały zaimplementowane do kodu: (i) wersja Burta-Foremana metody ***k,p*** z odpowiednio uporządkowanymi operatorami różniczkowania, dzięki czemu możliwe jest uniknięcie artefaktów tzw. zsymetryzowanego Hamiltonianu, (ii) oddziaływanie wymienne p-d (opisujące oddziaływanie między nośnikami a zlokalizowanymi momentami magnetycznymi oraz będące powodem pojawiania się spontanicznego namagnesowania) w Hamiltonianie ***k,p***, (iii) możliwość obliczeń struktury elektronowej supersieci. Rozszerzony kod został przetestowany pod względem poprawności, a następnie wykorzystany do analizy magnetycznych heterostruktur GaAs/AlGaAs/(Ga,Mn)As oraz supersieci InAs/GaSb, umożliwiając lepsze zrozumienie analizowanych układów. Przedstawiona rozprawa doktorska dostarcza ilościowe przewidywania wpływu pola elektrycznego na temperaturę Curie dla heterostruktur typu GaAs/AlGaAs/(Ga,Mn)As. W rezultacie okazuje się, że głównym fizycznym mechanizmem wywołującym te zmiany jest sterowanie gęstością dziur za pomocą zewnętrznego napięcia. Przyłożenie napięcia w odpowiednim kierunku wywołuje wzrost gęstości dziur, a to prowadzi do zwiększenia temperatury Curie w warstwie rozrzedzonego półprzewodnika magnetycznego (Ga,Mn)As. Te badania pokazały również, że chropowatość powierzchni między warstwami bramka/tlenek wprowadza silne rozpraszanie nośników, dlatego semi-klasyczne podejście jest bardziej odpowiednie w przypadku analizy i modelowania tych układów oraz daje wyniki bliższe danym eksperymentalnym. Badania układów InAs/GaSb w sposób jasny pokazały silny wpływ dyfuzji atomów indu oraz antymonu do sąsiednich warstw na strukturę elektronową oraz profile absorpcji tych układów, co zostało zaobserwowane również doświadczalnie.