

Uniwersytet Warszawski
Wydział Fizyki
Instytut Fizyki Teoretycznej



kanal Wydziału Fizyki
sekcja ds. pracownicz
płynęło dnia 28.04.16
określenie

ul. Pasteura 5, 02-093 Warszawa, tel: (+48 22)553-29-49, e-mail: ift@fuw.edu.pl

15 kwietnia 2015 r.

prof. dr hab. Witold Bardyszewski
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki UW
ul. Pasteura 5,

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Anny Korbeckiej pt.
"Teoria i modelowanie struktur półprzewodnikowych z modulowaną magnetyzacją".

Technologia półprzewodnikowa będąca podstawą rewolucji technologicznej, której jesteśmy świadkami już od dziesięcioleci, wykorzystuje najnowsze idee fizyki i wymaga mozolnej pracy przy projektowaniu urządzeń i układów półprzewodnikowych. Podobnie jak w wielu innych dziedzinach fizyki, postęp dokonuje się w wyniku zespołowego wysiłku wielu ośrodków zmierzającego do ciągłego poszerzania informacji na temat własności fizycznych i chemicznych materiałów półprzewodnikowych oraz metod modelowania struktur półprzewodnikowych. W efekcie powstają wysoce wyspecjalizowane aplikacje komputerowe pozwalające na projektowanie skomplikowanych układów półprzewodnikowych począwszy od skali nanometrowej, w której dominują prawa mechaniki kwantowej do skali makroskopowej. Skuteczne rozwijanie tego typu aplikacji wymaga rozwiązywania coraz trudniejszych problemów stawianych przez szybki rozwój techniki półprzewodnikowej. Omawiana rozprawa doktorska dotyczy modelowania struktur półprzewodnikowych za pomocą profesjonalnego pakietu numerycznego nextnano³ i obejmuje dwie grupy zagadnień. Pierwsza z nich dotyczy modelowania struktur zbudowanych z warstw półprzewodnikowych z modulowanym namagnesowaniem w ramach przybliżenia ośrodka ciągłego w przybliżeniu Thomasa-Fermiego i z uwzględnieniem kwantowania elektronowych poziomów energetycznych w studniach kwantowych. Wymagało to w szczególności wprowadzenia do kodu nextnano³ możliwości opisu oddziaływania wymiennego s,p-d między elektronami pasmowymi i jonami magnetycznym w rozcieńczonych półprzewodnikach magnetycznych. Druga grupa dotyczy wprowadzenia udoskonalonej metody opisu stanów elektronowych w heterostrukturach za pomocą tzw. Modelu Burta-Foremana w studniach kwantowych i tzw. supersieciach półprzewodnikowych i zastosowania jej do skomplikowanych układów wielowarstwowych.

Doktorat zawiera analizę standardowych heterostruktur typu studnie kwantowe GaAs/GaAlAs jak też heterostruktur z warstwami zawierającymi jony manganu. Za pomocą zmodyfikowanego pakietu nextnano³ zbadano wpływ pola elektrycznego na temperaturę Curie w tego typu układach. Zbadano też własności elektronowe heterostruktur ze złączoną przerwą energetyczną złożonych z dwóch sąsiadujących warstw z InAs i GaSb. Układy te pozwalają na realizację przejścia do stanu izolatora topologicznego. Precyzyjny opis tego zjawiska wymaga jednak niezwykle subtelnego modelowania teoretycznego.

Rozprawa składa się z krótkiego wprowadzenia, 4 rozdziałów i zwięzłego podsumowania.

Dołączono też trzy dodatki oraz bibliografię zawierającą 124 pozycje literaturowe..

W krótkim wprowadzeniu zawartym w rozdziale pierwszym przedstawiono kluczowe pojęcia z dziedziny fizyki półprzewodników dotyczące ich struktury i charakterystyki. Omówiono też pokrótce techniki produkcji półprzewodników zarówno objętościowych jak i warstwowych. W zwięzły sposób zaprezentowano struktury o obniżonej wymiarowości, takie jak studnie kwantowe, druty kwantowe czy też kropki kwantowe. Podrozdział poświęcony rozrzedzonym półprzewodnikom magnetycznym zawiera też wprowadzenie do spintroniki. Na zakończenie

wprowadzenia omówiona została istota schematu obliczeniowego pakietu nextnano³. Podane zostały podstawowe równania określające efektywny potencjał samouzgodniony oraz wyrażenia na prądy elektronowe i dziurowe w przybliżeniu dryfu i dyfuzji. Podejście stosowane w pakiecie obliczeniowym traktuje prądy w ramach schematu ośrodka ciągłego dopuszczając jednocześnie możliwość uwzględnienia efektów kwantowych przy wyznaczaniu lokalnej gęstości ładunku w strukturze. Na zakończenie krótkiego wprowadzenia autorka wylicza główne cele rozprawy oraz omawia jej zawartość.

Rozdział drugi został zatytułowany „Metody Teoretyczne”. Po krótkim wstępie dotyczącym struktury krystalicznej dyskutowanych związków półprzewodnikowych następują podrozdziały poświęcone teoretycznemu opisowi zagadnień zakreślonych we wstępie. W pierwszej kolejności autorka zajmuje się prezentacją tzw. metody k.p do opisu struktury pasmowej w heterostrukturach. Zwraca uwagę na fakt, że w przypadku braku dopasowania stałych sieci w sąsiadujących ze sobą warstwach może pojawić się naprężenie jednoosiowe. Metoda k.p pozwala na względnie proste uwzględnienie wpływu naprężenia na elektronową strukturę energetyczną. Styl prezentacji jest zwięzły, zrozumiały i zawiera wszelkie niezbędne informacje na temat hamiltonianów k.p dla kryształów objętościowych w strukturze blendy cynkowej i wurcytu z uwzględnieniem deformacji sieci i oddziaływania spin orbita. Zabrakło jedynie odnośnika do źródła, z którego pochodzi rysunek 2.3. Następnie bardzo szczegółowo omówiono metodę k.p w odniesieniu do heterostruktur półprzewodnikowych.

W sytuacji, gdy parametry pasmowe zmieniają się gwałtownie na granicy między różnymi półprzewodnikami prawidłowa konstrukcja hamiltonianu efektywnego i odpowiednich warunków brzegowych jest kluczowa dla dokładnego wyznaczenia pasm energetycznych elektronów. Należy przy tym rozróżnić dwa elementy mające wpływ na wynik końcowy. Przede wszystkim istotne jest jednoznaczne ustalenie postaci operatorów różniczkowych na ostrej powierzchni rozgraniczającej dwa materiały scharakteryzowane różnymi parametrami pasmowymi. Równie ważna jest prawidłowa ich dyskretyzacja w fazie obliczeń numerycznych. Autorka zaimplementowała teorię Burta-Foremana opisu stanów elektronowych w heterostrukturach opartą na zastosowaniu uniwersalnego potencjału periodycznego wspólnego dla wszystkich materiałów wchodzących w skład heterostruktury. Zastosowanie tego formalizmu i wyprowadzenie odpowiednich hamiltonianów efektywnych w jego ramach należy do jednych z ważniejszych wyników pracy. Ponieważ część rozprawy poświęcona jest strukturom zawierającym modulowane warstwy magnetyczne, dalsza część wprowadzenia teoretycznego w rozdziale 2 poświęcona jest opisowi oddziaływaniu wymiennemu w takich materiałach. Po bardzo krótkim wstępie dotyczącym różnych mechanizmów sprzężenia magnetycznego w ciałach stałych autorka omawia tzw. model Zenera, który znajduje zastosowanie w granicy względnie rzadkiego gazu swobodnych nośników, a więc w sytuacji charakterystycznej dla półprzewodników. Aby efektywnie opisać sprzężenie między zlokalizowanymi jonami magnetycznymi i swobodnymi dziurami podkład jonów magnetycznych traktowany jest w przybliżeniu pola średniego. Prezentacja tego modelu bardzo jest bardzo klarowna. Na zakończenie rozdziału 2, który ma na celu przedstawienie głównych założeń i metod stosowanych w rozprawie umieszczono króciutkie, niemal podręcznikowe omówienie własności supersieci półprzewodnikowych.

W trzecim, kolejnym rozdziale znajdujemy zasadnicze wyniki rozprawy poświęcone analizie struktur zawierających warstwy (Ga,Mn)As. Celem tej części było stworzenie realistycznego modelu tranzystora polowego (FET) z warstwą magnetyczną, pozwalającego na manipulowanie temperaturą Curie przejścia paramagnetyk - ferromagnetyk za pomocą zamiany koncentracji dziur, zgodnie z modelem Zenera zaprezentowanym w poprzednim rozdziale. Oprócz wyników rozprawy autorka umieściła w tym rozdziale wiele informacji na temat własności fizycznych badanego materiału. Dla prezentowanych wyników rozprawy szczególne znaczenie ma występowanie tzw. stanów powierzchniowych, których kontrola w procesie technologicznym jest praktycznie niemożliwa. Są one przyczyną tzw. pinningu poziomu Fermiego w środku przerwy energetycznej półprzewodnika co, jak wykazała autorka rozprawy, znacznie obniża możliwości sterowania

koncentracją dziur za pomocą potencjału przyłożonego do bramki tranzystora. Oddzielnym zagadnieniem diskutowanym w tej części rozprawy jest powiązanie temperatury Curie oraz namagnesowania z przyłożonym napięciem bramki. Cennym elementem tej części pracy jest porównanie z wynikami doświadczalnymi. Okazuje się, że wyniki modelowe dotyczące temperatury Curie dają niższe wartości niż eksperyment chociaż amplituda zmian T_C jest oddana poprawnie. Znacznie lepiej wypada porównanie namagnesowania nasycenia w funkcji napięcia bramki. Mimo tak dobrej zgodności z eksperymentem autorka rozszerzyła model teoretyczny przez uwzględnienie kwantyzacji poziomów energetycznych w studni kwantowej (Ga,Mn)As w omawianej strukturze FET. Stosując sześciopasmowy model k,p wyznaczono profile gęstości prawdopodobieństwa dla stanów dziurowych w studni z uwzględnieniem oddziaływania wymiany p-d. Niestety rysunki ilustrujące te profile (rys. 3.11) są tak małe, że praktycznie mało z nich wynika. Okazało się, że model kwantowy przewiduje znacznie mniejsze koncentracje dziur w obszarze magnetycznym przy ujemnych napięciach niż w przypadku modelu Thomasa-Fermiego. W efekcie, model uwzględniający skwantowaną naturę stanów dziurowych zawęża zakres zmian szerokości kanału przewodzącego i zmniejszenie zakresu zmian temperatury T_C i w ogólności daje wyniki sprzeczne z doświadczeniem. Podobne rezultaty uzyskano dla struktury FET ze studnią kwantową z (In,Mn)As. Na zakończenie tego rozdziału przedstawiono porównanie obliczeń struktury elektronowej supersieci AlGaAs/(Ga,Mn)As. Jak rozumiem, obliczenia zostały wykonane za pomocą pakietu nextnano³ rozszerzonego na przypadek supersieci zawierających warstwy z rozcieńczonego półprzewodnika. Wyniki opisane w tej części rozprawy zostały opublikowane w prestiżowym czasopiśmie Nature Physics w roku 2010.

Rozdział 4 skoncentrowany jest na zastosowaniach modelu Burta-Foremana i testach jego poprawności w odniesieniu do modelowania studni kwantowych i supersieci półprzewodnikowych. Model ten jest porównywany z bardziej rozpowszechnioną metodą zszytyzowanego hamiltonianu Luttingera. Porównanie wyników dla studni typu GaAs/AlGaAs oraz dla studni z półprzewodników azotkowych GaN/InAlN wykazało, że główne efekty wprowadzone przez model Burta-Foremana ujawniają się w dyspersji pasm dla dużych wartości wektora falowego. Niestety w tych ostatnich rachunkach pominięto istnienie silnych pól elektrycznych tak charakterystycznych dla tych materiałów. Zaprezentowane wyniki obliczeń współczynnika absorpcji w studniach kwantowych i supersieciach są dość typowe. Widoczna różnica w natężeniu teoretycznych widm absorpcji jest przypuszczalnie wynikiem niespójnego normowania. Współczynnik absorpcji, jako wielkość intensywna w zasadzie nie jest dobrze zdefiniowany dla struktur dwuwymiarowych. Przy okazji dyskusji zależności absorpcji od polaryzacji pojawiła się mała nieścisłość w definicji polaryzacji TE i TM, które wg autorki dotyczą światła rozchodzącego się odpowiednio w kierunku prostopadłym do kierunku wzrostu studni i w płaszczyźnie studni (str. 81). Powstaje pytanie: czym różnią się te kierunki? W rzeczywistości podane oznaczenia polaryzacji wywodzą się z fizyki światłowodów i oznaczają odpowiednio mody z wektorem elektryczny lub magnetyczny leżącym w płaszczyźnie studni. Rozdział kończy krótka analiza supersieci InAs/GaSb charakteryzującą się tzw. złamaną przerwą energetyczną, a w szczególności wpływem rozmycia powierzchni między warstwami na strukturę elektronową i widmo absorpcji.

Recenzowana rozprawa zawiera interesujące wyniki symulacji urządzeń półprzewodnikowych z zastosowaniem zarówno standardowego pakietu nextnano³ jak i rozszerzeń pakietu stworzonych przez autorkę. Główne wyniki dotyczą modelowania struktur zawierającymi jony magnetyczne i badania wpływu napięcia bramki tranzystora na temperaturę Curie oraz zastosowania modelu Burta-Foremana do obliczania struktury elektronowej studni kwantowych i supersieci półprzewodnikowych. Część wyników pracy była prezentowana na konferencjach oraz w prestiżowych czasopismach międzynarodowych. Doktorat spełnia kryteria poważnego osiągnięcia naukowego.

Znalazłem w pracy pewne usterki oraz drobne literówki. Na stronie 57 dyskutowana jest wielkość N_0 zdefiniowana jako „koncentracja Mn w kationowych położeniach”. Nie bardzo ma to sens, szczególnie że występuje we wzorze wielkość x_{eff} mnożąca N_0 i określona jako efektywna koncentracja manganu. Mam też zastrzeżenie do stosowania imiesłowów w składni, której przykładem jest zdanie „Wybierając jeden punkt k_0 w przestrzeni k możliwe jest rozwinięcie funkcji falowej wokół niego” (str 20).

Zauważyłem też kilka literówek, które pomijam. Poza tymi drobnymi zastrzeżeniami stwierdzam, że praca jest napisana bardzo dobrym i zrozumiałym stylem.

Uważam, że rozprawa doktorska mgr Anny Korbeckiej spełnia ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Wnoszę o dopuszczenie mgr Anny Korbeckiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Witold Bardyszewski