

Uniwersytet Warszawski
Wydział Fizyki
Instytut Fizyki Teoretycznej



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

27 listopada 2014 r.

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

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Joanny Płaziak pt.
"Modelowanie diod świecących i laserowych na bazie heterostruktur azotkowych".

W ostatnich latach obserwujemy ogromny postęp technologii produkcji urządzeń emitujących światło w zakresie podczerwieni i widzialnym z wykorzystaniem związków i stopów półprzewodnikowych typu III-V. Wiele wysiłku (z pozytywnym skutkiem) włożono w rozwój produkcji urządzeń wykorzystujących związki arsenu (AlAs, GaAs itp.). Obecnie jesteśmy świadkami burzliwego rozwoju technologii stosującej antymonki i azotki, co pozwoliło na znaczne rozszerzenie dostępnego zakresu emisji od tzw. środkowej podczerwieni, aż po ultrafiolet. Znaczenie postępu w tej dziedzinie podkreśla tegoroczna nagroda Nobla przyznana trzem badaczom: Isamu Akasaki, Hiroshi Amano i Shuji Nakamura za wynalezienie wydajnych diod emitujących światło niebieskie umożliwiających produkcję wydajnych i energooszczędnych źródeł światła. Wytwarzanie diod świecących, laserów półprzewodnikowych, jak też i wielu innych półprzewodnikowych urządzeń emitujących światło nie byłoby możliwe bez odpowiedniego zaplecza teoretycznego, a w szczególności bez narzędzi umożliwiających ich projektowanie i symulowanie. Omawiana rozprawa doktorska dotyczy zagadnień związanych z modelowaniem tego typu urządzeń z zastosowaniem profesjonalnego pakietu numerycznego nextnano³. Główną motywacją pracy były trudności pojawiające się w modelowaniu struktur azotkowych wynikające ze specyfiki tych materiałów, a w szczególności dużych wartości przerwy energetycznej, i w konsekwencji wysokich wartości nieciągłości pasm oraz silnych pól elektrycznych wywołanych samoistną polaryzacją oraz efektem piezoelektrycznym. W urządzeniach zbudowanych ze związków azotkowych, w odróżnieniu od dobrze zbadanych związków arsenu, występują silne niejednorodności pól działających na nośniki. Dodatkowo, silne pola elektryczne występujące w tego typu materiałach wymuszają konieczność stosowania w urządzeniach świecących takich jak diody elektroluminescencyjne czy lasery, bardzo wąskich studni kwantowych co z kolei wzmacnia rolę kwantowych procesów typu tunelowanie w obszarze aktywnym. Spośród istotnych zagadnień związanych z opracowaniem uniwersalnego modelu urządzeń omawianego typu autorka koncentruje się na trzech najistotniejszych problemach:

- a) Rozszerzenie istniejącego modelu transportu w złączach półprzewodnikowych opartego na przybliżeniu dryfu-dyfuzji zaimplementowanego w pakiecie nextnano³ na struktury azotkowe zawierające silne pola elektryczne.
- b) Zbadanie wpływu silnych pól występujących w złączu p-n na prędkość rekombinacji nośników w złączu.
- c) Oszacowanie roli balistycznego transportu kwantowo mechanicznego w cienkich strukturach studni i wielostudni kwantowych na bazie azotku galu.

Rozprawa zawiera krótkie wprowadzenie, 5 rozdziałów i zwięzłe podsumowanie. Na zakończenie dołączono również informację o publikacjach i wystąpieniach konferencyjnych autorki oraz bibliografię zawierającą 121 pozycji. Pierwsze trzy rozdziały mają charakter wprowadzenia i zawierają zarys teorii transportu w złączach półprzewodnikowych, opis własności związków azotowych oraz krótką charakterystykę metod numerycznych stosowanych w rozprawie i w pakiecie nextnano³. Pozostałe dwa rozdziały zawierają oryginalne wyniki dla struktur azotkowych uzyskane przez mgr J. Płaziak skonfrontowane z wynikami otrzymanymi dla standardowych półprzewodników.

Pierwszy rozdział stanowiący wprowadzenie do fizyki złącza półprzewodnikowego typu p-n rozpoczyna krótki wstęp na temat statystyki nośników i procesów transportu elektronów i dziur w przybliżeniu dryfu i dyfuzji. Najważniejsza część tego rozdziału, podrozdział 1.3 wyjaśnia podstawowe mechanizmy generacji i rekombinacji w półprzewodnikach. Zaprezentowany opis jest dość pobieżny i odwołuje się głównie do ogólnie dostępnych źródeł literaturowych. Nie mniej jednak omówiony jest kluczowy dla dalszych rozważań przedstawiony w pracy problem modyfikacji przekroju czynnego pułapek na wychwyt nośników w wyniku działania silnego pola elektrycznego. Jak słusznie podkreśliła autorka rozprawy, mechanizm rekombinacji na pułapkach może mieć krytyczny wpływ na właściwości złącza, a więc niezwykle istotny jest prawidłowe uwzględnienie tego typu procesów w teoretycznym modelu transportu. Esencją tego podrozdziału jest wprowadzenie wzoru na szybkość rekombinacji na pułapkach w obecności tunelowania, tzw. modelu RSH(E), czyli modelu Shockleya-Reada-Halla w obecności silnego pola elektrycznego. Rozdział pierwszy kończy bardzo zwięzła prezentacja zjawiska tunelowania przez barierę potencjału w ramach elementarnej mechaniki kwantowej.

Rozdział drugi zawiera omówienie struktury półprzewodników azotowych typu III-V takich jak związki binarne GaN, AlN, InN oraz ich stopy. Autorka prezentuje zależności podstawowych parametrów, takich jak stała sieci czy przerwa energetyczna od składu stopów dla tych półprzewodników. Zwraca uwagę na źródło występującej w azotkach o strukturze wurcytu silnej wbudowanej polaryzacji co istotnie różni tego typu związku od półprzewodników krystalizujących w strukturze blendy cynkowej.

Bardzo krótki rozdział trzeci omawia metodę wyznaczania prądu w modelu dryf – dyfuzja za pomocą pakietu nextnano³ oraz zmodyfikowaną wersję całkowania równań na prąd stosowaną w pracy. Podstawowa trudność w rozwiązywaniu nieliniowych równań na prąd i kwazipoziom Fermiego związana jest z niestabilnością numeryczną procedury Newtona, jest dodatkowo potęgowana w obecności silnych niejednorodności. Niestety, w całej rozprawie doktorskiej jest to najbardziej niezrozumiały fragment i jak rozumiem, w celu dokładnego zrozumienia procedury całkowania prądu należy skonsultować podane odnośniki. Podam tylko jeden przykład trudnego do rozszyfrowania zdania: (str. 42, par. 2) :”Dodatkowo zwiększyła się również stabilność numeryczna obliczeń dzięki temu, że w okolicy punktu gdzie wielkości s_n oraz s_p osiągają maksimum, prąd rekombinacyjny liczonego przeprowadzając sumowanie po najmniejszej liczbie punktów siatki”. Czytelnikowi pozostaje tylko się domyślać o jaką siatkę i jakie sumowanie chodzi.

Znacznie lepiej napisane są rozdziały 4 i 5 zawierające główne rezultaty rozprawy.

W rozdziale 4 omówiono specyfikę modelowania struktur półprzewodnikowych (diod pn) zbudowanych z azotków. Po wstępnej prezentacji fizyki złącza p-n oraz wpływu procesów rekombinacji na charakterystykę prądowo-napięciową diody autorka przedstawia wyniki obliczeń wykazujące, że silne pole elektryczne, występujące w tego typu materiałach znacznie redukuje ruchliwość nośników. Pole rzędu 1MV/cm może zredukować ruchliwość o czynnik kilka lub nawet o rząd wielkości, tak jak ma to miejsce w przypadku InN. Autorka wprowadza przy tej okazji fenomenologiczny wzór Zakhleniuka, który uzależnia ruchliwość od specyficznego parametru zawierającego informację o gradiencie potencjału i potencjału elektrochemicznego. W podrozdziale poświęconym modelowaniu diody elektroluminescencyjnej z kolei zwrócono uwagę na istotny

wpływ pole elektryczne na tempo rekombinacji w złączu, a co za tym idzie również na charakterystykę prądowo-napięciową diody. Jest to kolejny ważny wynik rozprawy wykazujący, że uwzględnienie wpływu pola na rekombinację jest szczególnie ważne w obszarze niskich napięć. Autorka wykazała, że uwzględnienie pola przy opisie rekombinacji może zwiększyć prąd o kilka rzędów wielkości. Zweryfikowała też hipotezę, że jeśli uwzględni się wpływ pola na prędkość rekombinacji to zmniejszenie koncentracji donorów, prowadzące do poszerzenia obszaru złącza redukuje rekombinację i obniża wartość prądu dla małych napięć. Zbadano też zależność temperaturową charakterystyk prądowo- napięciowych. Okazuje się, że uwzględnienie efektu tunelowania w procesie rekombinacji na pułapkach jest krytyczne w przypadku półprzewodników azotkowych. W następnym kroku przedstawiono wyniki symulacji diody GaN z pojedynczą studnią kwantową z $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$. Aby wyodrębnić efekty wywołane silnym polem porównano charakterystyki diod wyhodowanych w kierunku polarnym i niepolarnym. W tym drugim przypadku prąd przyjmuje niższe wartości niż w przypadku polarnym. Bardzo szczegółowo omówiono wpływ warstwy blokującej elektrony na charakterystykę prądowo-napięciową diody i podkreślono zgodność otrzymanych wyników z wynikami doświadczalnymi uzyskanymi w Instytucie Wysokich Ciśnień. Następnie przedstawiono model bardziej złożonej diody elektroluminescencyjnej zawierającej trzy studnie kwantowe. $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$. Wykazano, że silne pole elektryczne występujące w azotkach zmienia kształt studni i bariery do tego stopnia, że znacznie obiegają one od kształtu prostokątnego. Podobnie jak w poprzednim przypadku przeanalizowano rolę różnych mechanizmów rekombinacji w formowaniu potencjału elektrochemicznego oraz charakterystyki prądowo-napięciowej. Symulacja przepływu prądu przez diodę wykazała, że największa koncentracja elektronów i dziur występuje w studni zlokalizowanej po stronie typu n złącza i ta studnia generuje najwięcej światła w wyniku rekombinacji. Jest to ważny wynik, bowiem wskazuje na to, że zwiększanie liczby studni nie wpłynie znacząco na wydajność diody. Na zakończenie rozdziału przedstawiono symulacje diody laserowej zawierającej trzy studnie kwantowe $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$, warstwę blokującą elektrony i okładki z AlGaN mające zapewnić uwięzienie modu optycznego w obszarze aktywnym diody. Co ciekawe, analizowana struktura zawierająca węższe studnie niż poprzednio dyskutowana dioda luminescencyjna charakteryzuje się znacznie bardziej równomiernym rozkładem nośników w studniach kwantowych.

Rozdział 5 poświęcony jest transportowi balistycznemu przez cienkie złącza półprzewodnikowe. Fundamentalny problem w badaniu tego typu złącz polega na tym, że przybliżenie dryfu-dyfuzji jest nieadekwatne w reżimie silnych pól i znacznych nieciągłości pasm. Z drugiej strony opis czysto kwantowy w skali mezoskopowej jest również obciążony poważnym błędem. Nie mniej jednak zaproponowane przez autorkę metoda porównania charakterystyk prądowo napięciowych wyznaczonych w tych dwóch skrajnych przybliżeniach może nam dać pojęcie, które z nich jest bliższe prawdy. Do opisu transportu tunelowego zastosowano w pracy metodę macierzy przejścia i porównano uzyskane wyniki z rezultatami uzyskanymi za pomocą pakietu nextnano³ stosującego metodę funkcji Greena o kryptonimie CBR (Contact Block Reduction). Obie metody zostały szkicowo omówione na początku rozdziału i zilustrowane przykładami. Zaniepokoiły mnie różnice między wynikami obliczeń tunelowania uzyskanymi metoda macierzy przejścia zaproponowaną przez autorkę i metodą CBR. Wydawać by się mogło, że przy jednoznacznie postawionych warunkach wynik powinien być identyczny w obu przypadkach. Otwarte pozostaje pytanie, która metoda dała wyniki prawidłowe. Następnie autorka przeprowadziła staranne porównanie struktur o mniejszych niejednorodnościach zbudowanych z GaAs i AlAs oraz ich stopów z materiałami azotkowymi. Generalna konkluzja wskazuje na to, że efekty tunelowe dają o wiele większy wkład do prądu w przypadku związków azotkowych niż arsenowych co stawia pod znakiem zapytania skuteczność pakietu nextnano³ w symulacji tego typu struktur w ramach przybliżenia dryf - dyfuzja.

W podsumowaniu stwierdzam, że recenzowana rozprawa zawiera interesujące wyniki symulacji urządzeń półprzewodnikowych z zastosowaniem zarówno standardowego pakietu nextnano³ jak i oryginalnych programów stworzonych przez autorkę. Zawiera ważne wyniki dotyczące efektów rekombinacji i tunelowania w przepływie prądu przez realistyczne heterostrukтуры z półprzewodników azotkowych. Wyniki pracy były prezentowane na wielu konferencjach. Doktorat spełnia więc kryteria poważnego osiągnięcia naukowego.

Strona edytorska rozprawy jest praktycznie bez zarzutu. Autorka dołączyła do pracy szczegółowy spis ilustracji i tabel oraz spis skrótów. Pewne drobne zastrzeżenia dotyczą rysunków, które czasami są zbyt małe lub są opisane bardzo drobną, trudną do odczytania czcionką. Przykładem może służyć rysunek 4.42, w którym legenda zasłania praktycznie cały wykres. Mam pewne zastrzeżenie co do języka, zawierającego zwroty slangowe. Na przykład rysunek 5.5 zawiera diagram przedstawiający algorytm metody CBR, w którym mamy następujący krok: „Obliczanie eigenstates H^0 i wyznaczenie self-energii”. Główne zastrzeżenia dotyczą jednak gramatyki, a szczególnie użycia imiesłówów, tak jak np. w zdaniu „Jednak stosując go do opisywanych w rozdziale przykładów okazał się niewystarczający”, na stronie 83 i wielu innych miejscach.

Mimo tych zastrzeżeń, w mojej ocenie główne tezy rozprawy są przedstawione dość jasno. Uważam więc, że rozprawa doktorska mgr Joanny Płaziak spełnia ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Wnoszę o dopuszczenie mgr Joanny Płaziak do dalszych etapów przewodu doktorskiego.


Witold Bardyszewski