

INSTYTUT FIZYKI TEORETYCZNEJ
UNIwersYTET WARSZAWSKI
UL. PASTEURA 5, 02-093 WARSZAWA

prof. dr hab. Witold Bardyszewski
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski
ul. Pasteura 5, 00-681 Warszawa

**Recenzja pracy doktorskiej mgr inż. Herberta Mączko
pt.: "Obliczenia struktury pasmowej i wzmocnienia optycznego dla części
aktywnej nowoczesnych laserów półprzewodnikowych"**

Projektowanie współczesnych półprzewodnikowych urządzeń opto-elektronicznych wymaga precyzyjnego modelowania własności struktur i materiałów używanych do ich konstrukcji. Dzięki nowoczesnej technologii półprzewodnikowej można budować urządzenia działające w szerokim zakresie parametrów. Przyrządy takie jak diody świecące czy lasery półprzewodnikowe weszły do codziennego użytku. Często też stanowią one elementy składowe niezwykle złożonych systemów telekomunikacyjnych, bez których nie mogłaby istnieć nasza cywilizacja. O sukcesie takiej czy innej konstrukcji, niezależnie od epoki decydują jednak względy ekonomiczne, czyli mówiąc krótko - niski koszt produkcji. Stanowią one wraz z wymaganiami technicznymi prawdziwe wyzwanie dla przemysłu elektronicznego wymagającego starannego modelowania nowych urządzeń. Recenzowana rozprawa napisana przez p. Herberta S. Mączko pod kierunkiem p. dr hab. Marty Gładysiewicz-Kudrawiec poświęcona jest modelowaniu wzmocnienia optycznego w materiałach i strukturach stanowiących obszar aktywny laserów półprzewodnikowych na podstawie realistycznych obliczeń elektronowej struktury pasmowej dla szerokiej klasy półprzewodników z grupy IV i związków półprzewodnikowych typu III-V oraz ich stopów. Zawarte w niej wyniki mogą zawierać ważne wskazówki dla inżynierów zajmujących się projektowaniem i produkcją tego typu urządzeń. Istotnym kryterium wspomnianym przez autora pracy jest możliwość integracji badanych struktur z technologią krzemową, za którą przemawiają argumenty ekonomiczne, ale też i techniczne. Autor rozprawy zwraca uwagę na fakt, że wzmocnienie optyczne związane z przejściami optycznymi w danej strukturze elektronowej jest zdeterminowane przez dwa podstawowe czynniki: reguły wyboru i gęstość stanów, które w ostatecznym rachunku mają wpływ na proces odwrócenia populacji i wymuszonej emisji światła i na tych aspektach koncentruje się jego analiza.

Rozprawa została napisana w języku polskim, liczy 134 strony i składa się z sześciu rozdziałów obejmujących wstęp i podsumowanie. Autor rozprawy jest współautorem czterech artykułów i trzech komunikatów konferencyjnych związanych z tematyką rozprawy.

W krótkim wstępie stanowiącym rozdział pierwszy rozprawy autor omawia cel oraz zakres rozprawy. Głównym celem pracy postawionym przez autora we wstępie jest optymalizacja wzmocnienia optycznego w strukturach półprzewodnikowych wykorzystujących zjawisko uwięzienia elektronów i dziur w studniach kwantowych, poddających się integracji z podłożem krzemowym. Do materiałów tego typu należą struktury zawierające m.in. stopy GeSn oraz BGeAs. Jak rozumiem, autor zdaje sobie sprawę, że dokładne, ilościowe wyznaczenie tej wielkości w prostym modelu pomijającym chociażby oddziaływanie kulombowskie między elektronami i dziurami jest skazane na niepowodzenie i dlatego słusznie podkreśla, że jego badania mające charakter porównawczy i wytyczają główne trendy oraz identyfikują główne przeszkody na drodze do uzyskania pożądanego parametru materiałowego.

W rozdziale drugim dysertacji przedstawiono podstawowe ramy teoretyczne stosowane do wyznaczania modelowych własności optycznych badanych struktur półprzewodnikowych. Cel ten jest realizowany w trzech etapach. Punktem wyjścia do analizy struktur opartych na półprzewodnikach mieszanych są przedstawione przez autora schematy interpolacyjne pozwalające na wyznaczanie parametrów pasmowych stopów półprzewodnikowych na podstawie osiągalnych w literaturze danych dotyczących materiałów składowych. Parametry pasmowe uzyskane w wyniku interpolacji są następnie używane do obliczeń pasmowych w ramach przybliżenia k.p. Ważnym elementem pracy jest porównanie kilku modeli k.p. różniących się liczbą parametrów, począwszy od przybliżenia parabolicznego poprzez model sześciopasmowy, aż do najbardziej rozbudowanego modelu 30-to pasmowego. Wybór metody k.p. w naturalny sposób współgra z zastosowaną w pracy metodą rozwijania funkcji falowej obwiedni elektronów w studni kwantowej w bazie fal płaskich z periodycznymi warunkami brzegowymi. Podejście to pozwala autorowi uniknąć pytań na temat warunków ciągłości obwiedni oraz jej pochodnej na granicy różnych materiałów, bowiem rozwinięcie w fale płaskie gwarantuje różniczkowalność obwiedni w całym zakresie. W trzecim stadium wyznaczane są widma optyczne, które wymagają znajomości rozkładu gęstości ładunku w studniach kwantowych oraz kwazipoziomów Fermiego dla wzbudzonych elektronów i dziur. Są to wielkości ze sobą sprzężone i w szczególności w strukturach niejednorodnych, takich jak studnie kwantowe, wymagają rachunków samouzgodnionych wykorzystujących lokalną gęstość stanów. Jest to w mojej ocenie najtrudniejsza faza obliczeń, wnosząca dodatkowe ryzyko błędów związane z tzw. bocznymi minimami pasma przewodnictwa mogącymi w znaczący sposób wpływać na położenie kwazipoziomów Fermiego w zależności od stopnia pobudzenia. Zwieńczeniem tych wysiłków jest wyznaczenie materiałowego wzmocnienia optycznego w ramach

przybliżenia dipolowego. Na tym etapie pojawiają się kolejne parametry opisujące naturalne poszerzenie linii absorpcyjnej mogące w znacznej mierze zniekształcić wynik końcowy, szczególnie w obszarze podprogowym.

Kolejny rozdział jest w pewnym sensie poligonem doświadczalnym dla metod opisanych w rozdziale drugim w zastosowaniu do kryształów jednorodnych i studni kwantowych. Dyskutowane są różnice otrzymane z zastosowaniem modeli k.p o różnej liczbie pasm bazowych. W szczególności podkreślono wagę oddziaływania spin orbita. Wiadomo, że oddziaływanie to w przypadku Ge czy GaAs wnosi około dwudziestoprocentowy wkład do szerokości przerwy energetycznej i nie może być pominięte. Zgodnie z oczekiwaniami liczba pasm uwzględniona w modelu generalnie ma istotny wpływ na strukturę elektronową, jednak dopóki przejścia optyczne zlokalizowane są w okolicy punktu gamma, główny efekt wiąże się ze sprzężeniem między pasmem przewodnictwa i pasmem walencyjnym dającym znaczną poprawkę do krzywizny pasma przewodnictwa. Autor zwraca uwagę na to, że zależność wzmocnienia optycznego od stopnia pobudzenia jest modyfikowana nie tylko przez kształt pasm w okolicy punktu gamma, ale też przez położenia kwazipoziumu Fermiego, które może z kolei może być zdeterminowane przez kumulację elektronów w okolicy minimów bocznych, nie dających wkładu do prostych przejść optycznych. W modelach k.p nie obejmujących całej strefy Brillouina minima te zostały włączone do obliczeń w ramach przybliżenia parabolicznego. Okazuje się, że realistyczny opis struktury pasmowej materiałów z wąską przerwą takich jak np. stop GeSn wymaga użycia modelu 30-to pasmowego, który pozwala śledzić przejście od półprzewodnika ze skośną przerwą z małą zawartością molową cyny, do wąskoprzerwowego półprzewodnika z przerwą prostą. Model ten charakteryzuje się jednak dużą liczbą parametrów o dużym marginesie niepewności. Nie mniej prowadzi do ciekawych wyników jakościowych, takich jak stwierdzenie, że w przypadku stopu GeSn o wąskiej przerwie prostej ostateczny kształt widma optycznego jest zdeterminowany przez zależność elementu macierzowego przejścia od wektora k i dopiero uwzględnienie 30 pasm oddaje realistyczny przebieg krzywej wzmocnienia. Autor zwraca też uwagę, że przy pewnych składach stopu GeSn może dochodzić do degeneracji bocznych dolin pasma przewodnictwa i doliny w punkcie gamma co praktycznie może wykluczać dany materiał z potencjalnego zastosowania do budowy laserów. Wyraźnie widać tutaj przewagę modelu 30-to pasmowego, który jako jedyny z rozważanych modeli jest w stanie opisać taką sytuację bez odwoływania się do dodatkowych przybliżeń. Na zakończenie tego rozdziału przedstawiono wnioski wynikające z uwzględnienia potencjału samouzgodnionego w pobudzanych studniach kwantowych na przykładzie studni kwantowych BGeAs/GaP. Tutaj ponownie zwrócono uwagę na wagę stanów związanych z minimami bocznymi tym razem położonymi na osi delta. Minima te stanowią swoisty rezerwar wolnych stanów elektronowych i prowadzą do swoistego przyspi-

lenia kwazipoziomu Fermiego w paśmie przewodnictwa. Przejawem tego zjawiska jest efektywne rozdzielanie ładunku dodatniego i ujemnego pomiędzy studnię i barierę, które autor opisuje stosując samouzgodniony potencjał efektywny uzyskany przez rozwiązanie równania Poissona i Schrödingera. Ostatni wykres (rys. 3.10) wykazuje dramatyczną różnicę między krzywą wzmocnienie obliczoną z samo-uzgodnieniem i bez. Na tym rysunku zagadkowy jest głęboki "ogon" absorpcji (ujemnego wzmocnienia) sięgający daleko poniżej progu absorpcji. Czy nie jest to przypadkiem efekt nadmiernego poszerzenia linii widmowych w modelu Lorentza (znany problem przy obliczeniach tego typu) ? Pojawia się również oczywiste pytanie o parametry (koncentracja, temperatura itp.), którym odpowiadają krzywe na rysunku 3.10.

Rozdział czwarty zawiera ważne wyniki rozprawy - zestawienie realistycznych parametrów pasmowych, które mogą być użyteczne przy modelowaniu struktur rozpatrywanych w rozprawie. Szczególnie cenna jest część poświęcona studniom kwantowym na bazie stopów półprzewodnikowych grupy IV: GeSn/Ge i GeSn/SiGeSn w ramach modelu 8-mio pasmowego. Oryginalnym wynikiem rozprawy są zestawienia parametrów dla modelu 30-to pasmowego w przypadku objętościowych kryształów GeSn podane w podrozdziale 4.1.3, w którym wbrew tytułowi, nie ma ani słowa o domieszkowaniu fosforem. Wygląda na to, że tytuł tego podrozdziału został skopiowany z tytułu podrozdziału 5.1.3, który rzeczywiście zajmuje się domieszkami fosforu w GeSn. Druga część rozdziału czwartego koncentruje się na parametrach związków III-V i ich stopów. Na ogół są to dane dość dobrze udokumentowane w literaturze. Oryginalny wkład autora polega na szczegółowym omówieniu związków boru BAs i BP.

Rozdział piąty stanowi zwieńczenie rozprawy i zawiera wyniki obliczeń dla wybranych struktur z dwóch rodzin półprzewodników wymienionych na wstępie. W pierwszej kolejności omawiane są struktury oparte o stop GeSn. Materiał ten jest intensywnie badany w związku z zastosowaniami do budowy laserów w średniej i dalekiej podczerwieni. Dokładne strojenie przyrządów tego typu wymaga zastosowania tzw. inżynierii pasm i pod tym kątem przeanalizowano różne układy studni kwantowych z GeSn z barierami z czystego germanu lub stopu GeSiSn na wirtualnym podłożu GeSn/Si. Analizowane jest również wzmocnienie optyczne w objętościowych kryształach GeSn. W przypadku studni GeSn/Ge autor przedstawia racjonalne argumentów uzasadniających zakresy optymalnych szerokości studni i zawartości molowej Sn w studniach oraz odnosi się do obecności minimów w punkcie L. Przedstawiona analiza jak rozumiem nie obejmuje potencjału samo-uzgodnionego studni. Nie mniej, wynikające z niej wskazówki można przyjąć za dość wiarygodne.

Następna rodzina studni kwantowych GeSn/SiGeSn na wirtualnym podłożu GeSn dysponuje dodatkowym stopniem swobody pozwalającym na niezależne dostosowanie stałej sieci

i struktury pasmowej, w tym przerwy energetycznej. Ilustrują to znakomicie rysunki 5.10 i 5.11. Szkoda tylko, że w kontekście dyskusji na temat polaryzacji emitowanego światła w zależności od składu nie odróżniono na rys. 5.11 poziomu lekkich i ciężkich dziur, tak jak to elegancko uczyniono na rys. 5.26 czy 5.35. Biorąc pod uwagę mnogość różnych kombinacji składów studni i bariery, autor przyjął logiczny schemat, według którego oddzielnie rozpatrzono struktury dopasowane sieciowo oraz studnie naprężone. W przypadku struktur bez naprężenia sporo uwagi poświęcono optymalizacji barier poprzez zmianę zawartości krzemu oraz roli minimów w punkcie L. Następnie zwrócono uwagę na możliwość manipulowania polaryzacją emitowanego światła poprzez wbudowane naprężenie studni. Okazuje się, że dla stosunkowo dużego zakresu zawartości Sn w studni można uzyskać emisję światła o polaryzacji TM, a stopień jego polaryzacji jest głównie zdeterminowany przez naprężenie studni.

Wzmocnienie optyczne w krysztalach objętościowych GeSe analizowane jest za pomocą modelu 30 pasm. Pojawia się dyskusja wpływu temperatury oraz domieszkowania fosforem na położenie kwazipozymów Fermiego i ostateczny kształt widma wzmocnienia. Okazuje się, że domieszkowanie może mieć w niektórych przypadkach decydujący wpływ na działanie lasera na bazie GeSe.

W dalszej części rozdziału piątego autor wykorzystuje model 8-pasmowy w oparciu o zebrane dane materiałowe zaprezentowane w rozdziale 4 do analizy układu studni BGaAs/InP. Rozpatrzono układy ze studniami naprężonymi ściskająco, rozciągająco i dopasowanymi do sieci bariery. W ramach dyskusji uwzględniono samouzgodniony potencjał w studni, a w szczególności jego modyfikację w wyniku obecności dolin na osi delta. Kluczowym wynikiem tej części jest mapa przedstawiająca maksymalne wzmocnienie optyczne w funkcji szerokości studni i ułamka molowego BAs w BGaAs. Na zakończenie rozdziału zbadano wpływ modyfikacji studni BGaAs/GaP poprzez dodawanie atomów z grupy III i V, skupiając uwagę w szczególności na roli doliny delta.

Praca jest w mojej ocenie ogólnej bardzo wartościowa i wpisuje się w aktualne trendy badań światowych zmierzających do wytworzenia laserów półprzewodnikowych na podłożach krzemowych, działających w zakresie średniej i dalekiej podczerwieni. Życie przyzwyczaiło mnie do prac doktorskich, które w kilku rozdziałach wstępnych dość łagodnie, czasem może zbyt łagodnie, wprowadzają czytelnika w tematykę rozprawy. W tym przypadku od samego początku mamy do czynienia z raportem technicznym, trudno dostępnym dla osób spoza branży. Nie jest to bynajmniej zarzut. Rozprawa porządkuje obecny stan wiedzy na temat laserów na studniach kwantowych i zawiera wiele aktualnych danych na ten temat o czym świadczy chociażby bardzo obszerna bibliografia. Wyniki numeryczne i płynące z nich wnioski stanowią ważny wynik, ale nie jest to jedyne osiągnięcie autora. Jak rozumiem

w toku pisania doktoratu stworzył on i ciągle rozwija zestaw narzędzi numerycznych do wykonywania obliczeń materiałowego wzmocnienia optycznego, otwarty na kolejne ulepszenia. Jest to z pewnością działanie z pożytkiem dla całej grupy badawczej.

Analizując stronę edytorską rozprawy, chciałbym pochwalić bardzo staranne i przemyślane rysunki, chociaż czasami brakowało mi szczegółowych objaśnień odnośnie ich zawartości, o czym już wspominałem. Wspomniałem już hermetyczny, techniczny język rozprawy sprawiający, że nie czyta się jej łatwo, ale z całą pewnością tekst nie zawiera luk logicznych. Zawiera za to sporą liczbę tzw. literówek, średnio jedną na pięć stron.

Mam kilka uwaga odnośnie podstaw teoretycznych pracy. W rozprawie, bardzo słusznie, uwypuklona jest rola struktury elektronowej badanych układów i na niej koncentruje się główny wysiłek autora. Wzmocnienie optyczne wyznaczone na tej podstawie ogranicza się do modelu jednoelektronowego z pominięciem efektów ekscytonowych i oddziaływania z fononami. Można mieć zastrzeżenia do modelu jednorodnego poszerzenia linii, czy też pominięcia tzw. wzmocnienia ekscytonowego, ale można się chyba zgodzić z tezą, że w wyznaczonych ramach, zaprezentowany model jest konsystentny i zasługujący na zaufanie. Zdaję sobie sprawę, że dalsze jego ulepszanie polegające na wyjściu poza model jednocząstkowy byłoby niezwykle trudne. Uwagi te uzasadniają moją bardzo wysoką ocenę pracy.

Pomijając drobne uwagi formalne stwierdzam więc, że rozprawa znacznie poszerza wiedzę na temat układów półprzewodnikowych opartych na stopach germanu, cyny i krzemu oraz związków boru w kontekście potencjalnych zastosowań w optoelektronice. Precyzyjne rachunki wykonane przez autora wskazują optymalne parametry tych materiałów pod kątem budowy laserów.

Uważam zatem, że rozprawa doktorska mgr inż. Herberta Mączko spełnia wszelkie warunki niezbędne do dopuszczenia do publicznej obrony.

Warszawa, 4 stycznia 2021 r.


prof. dr hab. Witold Bardyszewski