

Łódź, 5 października 2020 r.

dr hab. inż. Robert Sarzała, prof. uczelni
Politechnika Łódzka
Instytut Fizyki
Wydział Fizyki Technicznej, Informatyki i Matematyki Stosowanej
ul. Wólczańska 219, 90-924 Łódź

Recenzja Rozprawy Doktorskiej pt.
„Obliczenia struktury pasmowej i wzmocnienia optycznego dla części
aktywnej nowoczesnych laserów półprzewodnikowych”
Autor rozprawy: mgr inż. Herbert S. Mączko
Promotor: dr hab. inż. Marta A. Gładysiewicz-Kudrawiec

Recenzowana rozprawa ma charakter pracy teoretycznej, w której główne wyniki otrzymano posługując się modelowaniem komputerowym. Rozprawa dotyczy obliczeń struktury pasmowej oraz optycznego wzmocnienia materiałowego materiałów mogących być potencjalnie wykorzystanych jako obszary czynne laserów półprzewodnikowych, których cechy materiałowe umożliwiają ich bezpośrednią integrację z urządzeniami optoelektronicznymi wykonanymi w technologii krzemowej. Celem pracy jest teoretyczne przewidzenie rozkładów spektralnych wzmocnienia oraz jego wartości m.in. w takich materiałach jak studnie kwantowe GeSn/Ge, GeSn/SiGeSn czy BGaAs/GaP. Główny nacisk kładzie się tutaj na uzyskanie odpowiedzi na pytanie, jak poszczególne elementy materiałowe tworzące obszar czynny lasera wpływają na wartość wzmocnienia oraz na znalezienie optymalnych parametrów materiałowo-konstrukcyjnych umożliwiających otrzymanie dużego wzmocnienia optycznego. Analizowane obszary czynne dostosowane są do emisji fali z zakresu granicy bliskiej i średniej podczerwieni oraz światła czerwonego. Główne zastosowania wspomnianych przyrządów to diagnostyka medyczna, czujniki, analizatory składu gazów i cieczy. Uzyskanie laserów półprzewodnikowych, które mogą być w sposób prosty wytwarzane na tanich podłożach krzemowych, teoretycznie powinno znacznie zmniejszyć ich koszty oraz zwiększyć ich upakowanie i integrację z innymi systemami optoelektronicznymi.

Rozprawa obejmuje łącznie 132 strony, z czego 111 stanowi treść rozprawy. Reszta to wykaz przytoczonej literatury oraz spis rysunków. Pracę poprzedza spis treści oraz krótki dwustronicowy wstęp. Właściwą część pracy stanowi 5 rozdziałów, z których ostatni jest podsumowaniem pracy.

Rozprawę można podzielić na dwie zasadnicze części. Rozdziały 2-4 zawierają materiał wprowadzający i mają charakter bardziej ogólny, jak opis modeli struktury

pasmowej oraz schematów interpolacyjnych, lub bardziej szczegółowy, jak niezwykle ważny w modelowaniu rozdział poświęcony parametrom materiałowym modelowanych struktur półprzewodnikowych. Drugą część pracy stanowi rozbudowany rozdział 5 obejmujący analizę wybranych rozwiązań konstrukcyjno-materiałowych przede wszystkim pod kątem ich wzmocnienia materiałowego.

Rozdział pierwszy stanowi krótki wstęp do całej pracy. Oprócz zwięzłego nakreślenia tematyki pracy zawiera on główną tezę pracy: *Struktury półprzewodnikowe, w szczególności studnie kwantowe, bazujące na materiałach: GeSn i BGeAs są obiecującymi strukturami do zastosowań w aktywnych rejonach laserów półprzewodnikowych, które można zintegrować z podłożem z Si.*

Rozdział drugi składa się z siedmiu, w większości krótkich, podrozdziałów. Pierwszy z nich przedstawia ogólnie stosowane w teorii półprzewodników schematy interpolacyjne. W drugim omawiane są podstawowe teorie i wzory na wyznaczenie grubości krytycznej cienkich epitaksjalnych warstw półprzewodnikowych. Trzeci podrozdział to omówienie modeli wyznaczania energetycznej struktury pasmowej półprzewodników. Główna część poświęcona jest tu omówieniu podstaw modelu $k \cdot p$ w schemacie 6-, 8- i 30-pasmowym. Następne dwa podrozdziały to odpowiednio omówienie pojęcia gęstości stanów oraz quasi-poziomów Fermiego. Rozdział zamykają dwa podrozdziały. Pierwszy z nich skupia się na zagadnieniu samouzgodnionego rozwiązania równań Schroedingera i Poissona, a drugi na metodach obliczeń wzmocnienia optycznego.

W rozdziale trzecim, składającym się z trzech podrozdziałów, Doktorant próbuje odpowiedzieć na pytanie, jak zastosowanie różnych (przedstawionych w rozdziale 2) modeli wpływa na otrzymane wyniki tj. strukturę pasmową i wzmocnienie materiałowe. Jako materiał testowy wybrano tu stop GeSn, a pierwsze porównanie przeprowadzono dla kryształu Ge. Doktorant zwraca uwagę, że modele 6- i 8-pasmowe są stworzone przede wszystkim do opisu pasm podstawowych w okolicach punktu Γ . Analizuje przydatność modeli z uwagi na wielkość założonej koncentracji nośników, grubość studni kwantowej, wielkość przerwy energetycznej, dodanie oddziaływania spin-orbita. Dochodzi do wniosku, że modele 6- i 8-pasmowe nie są odpowiednie do opisu struktur o wąskich przerwach energetycznych. Następna część poświęcona jest wpływowi na wartość wzmocnienia obecności dolin Δ i L, która prowadzi do straty części nośników. Na końcu rozdziału mamy analizę wpływu na obliczenia wzmocnienia uwzględnienia w rozwiązaniu samouzgodnienia równań Schroedingera i Poissona. Pokazane to zostało na przykładzie struktury BGeAs/GaP.

Zamykający pierwszą część pracy rozdział czwarty poświęcony jest przedstawieniu parametrów materiałowych analizowanych w pracy struktur półprzewodnikowych, które zostały użyte do modelowania. Na początku Doktorant przedstawia zbiór parametrów dla materiałów GeSn i SiGeSn. Parametry te uzyskano na bazie interpolacji z dość dobrze określonych parametrów dla materiałów prostszych tzn. Si, Ge i α -Sn. W drugiej części rozdziału zamieszczono opis uzyskania danych materiałowych dla struktur BGeAs/GaP oraz tychże struktur rozszerzonych o pierwiastki B, Al, In i As. Z braku odpowiednich danych Doktorant oparł się tu głównie na interpolacji na bazie związków podwójnych takich jak fosforki tzn. BP, AlP, GaP, i InP oraz arsenki BAs, GaAs, i InAs, a także materiałów

potrójnych GaInP, GaInAs i GaPAs. Mimo i tak już uproszczonego podejścia trudnością okazało się uzyskanie parametrów dla takich materiałów jak BAs i BP. Propozycja zestawu parametrów dla tych materiałów znalazła się w kolejnych dwóch podrozdziałach niniejszego rozdziału pracy. W pozyskaniu odpowiedniego zbioru parametrów Doktorant posługiwał się danymi eksperymentalnymi dostępnymi w literaturze, pracami teoretycznymi innych autorów, a także propozycjami zaczerpniętymi od innych zespołów badawczych.

Druga część pracy to obszerny rozdział poświęcony analizie wybranych struktur półprzewodnikowych ze względu na ich strukturę pasmową i w konsekwencji możliwość uzyskania z nich efektywnego optycznego wzmocnienia materiałowego. Rozdział ten zawiera główne wyniki pracy i składa się z dwóch głównych podrozdziałów, które dodatkowo podzielone są na części. Pierwszy podrozdział poświęcony jest analizie struktur opartych na GeSn. Rozważane są tu studnie kwantowe GeSn/Ge, studnie kwantowe GeSn/SiGeSn oraz kryształy objętościowe GeSn. Drugi podrozdział to analiza struktur opartych o materiał BGeAs. Doktorant skupia się tu na studniach kwantowych BGeAs/GaP, które w dalszej części modyfikuje dodając do tych materiałów pierwiastki z III i V grupy układu okresowego. Doktorant przedstawia tu szeroką analizę wspomnianych struktur półprzewodnikowych pod kątem np. ich składu i szerokości studni kwantowych. Wyniki uzyskuje w oparciu o 8- i 30-pasmowe modele $k\cdot p$, także z uwzględnieniem odkształceń i obecności dolin bocznych. Dużo uwagi poświęca doborowi parametrów struktury pozwalających uzyskać przejścia proste, nie zaś skośne. Konsekwencją tych działań jest uzyskanie optymalnych teoretycznie składów materiału studni i jej grubości ze względu na wartość i spektralne położenie wzmocnienia materiałowego. Osobna część pracy poświęcona jest analizie możliwości uzyskania światła o konkretnej polaryzacji za pomocą odpowiednio dobranego składu materiałowego, a co za tym idzie wartości odkształceń w strukturze półprzewodnikowej. Konsekwencją tego jest osobna analiza wpływu składu bariery i wyboru podłoża na wcześniej wspomniane efekty. W części pracy poświęconej objętościowym kryształom GeSn Doktorant sprawdza wpływ domieszkowania fosforem na wypełnienie stanów z dolin L, a tym samym polepszenia warunków dla przejść prostych z doliny Γ . Korzysta tu z 30-pasmowego modelu $k\cdot p$. Podrozdział poświęcony materiałowi BGeAs to przede wszystkim poszukiwanie rozwiązań konstrukcyjno-materiałowych pozwalających uzyskać wzmocnienie materiałowe z tych struktur o odpowiednio dużej wartości. W obliczeniach tych Doktorant dodatkowo używa samouzgodnienia równań Schroedingera i Poissona. Odpowiednie dobranie składu studni i jej rozmiarów umożliwia uzyskanie prostej przerwy energetycznej i redukcję odkształceń, a także sterowanie polaryzacją emitowanego światła. Dalsza analiza przeprowadzana jest dla wybranych składów materiałowych i szerokości studni kwantowych. Konsekwencją tego jest propozycja studni kwantowej o odpowiednio dobranych parametrach materiałowych i geometrycznych umożliwiającą teoretyczne otrzymanie wzmocnienia optycznego dla wybranej polaryzacji światła TE lub TM. W dalszej części analizy Doktorant sprawdza wpływ modyfikacji studni i barier poprzez dodanie do nich innych pierwiastków. Jednym z celów tej analizy jest uzyskanie odpowiedzi na pytanie, jaki wpływ na wartość wzmocnienia optycznego będzie miała obecność warstw materiałowych mogących pełnić rolę falowodu w strukturze laserowej.

Pracę zamyka zwięźle podsumowanie uzyskanych wyników oraz lista opublikowanych prac Doktoranta nawiązujących do treści jego rozprawy doktorskiej.

Przedstawiona rozprawa jest obszernym zestawem modeli i schematów obliczeniowych wykorzystywanych do numerycznego wyznaczania struktury pasmowej i materiałowego wzmocnienia optycznego półprzewodnikowych kryształów objętościowych i zbudowanych na ich bazie studni kwantowych. Wspomniane modele i schematy obliczeniowe zostały zastosowane do wybranych układów materiałowych, które z kolei zostały poddane systematycznej analizie. Praca zawiera także bardzo obszerny, kompletny i unikalny zestaw parametrów materiałowych wyselekcjonowanej grupy materiałów optoelektronicznych. Kluczem do tego wyboru była możliwość ich dopasowania do podłoży krzemowych i uzyskania w ten sposób przyrządów czerpiących to co najlepsze z materiałów typowo elektronicznych i materiałów optoelektronicznych. Pierwsza część pracy ma niewątpliwie duże walory dydaktyczne np. dla studentów i doktorantów zajmujących się tematyką przyrządów optoelektronicznych. Zawarte w niej dane materiałowe dodatkowo stanowią bardzo dobrą bazę, którą można wykorzystać do innych badań w obszarze przyrządów optoelektronicznych. Niewątpliwymi zaletami drugiej części jest obszerna i unikatowa analiza własności optycznych struktur studni kwantowych GeSn/Ge oraz GeSn/SiGeSn ze względu na zmianę wielu ich parametrów materiałowo-konstrukcyjnych. Warte uwagi jest też zaproponowanie w pracy autorskich rozwiązań konstrukcyjno-materiałowych dla studni kwantowych BGaAs/GaP wraz z ich wariantami. Wartościowy jest też ujednolicony sposób wykonania obliczeń dla różnych struktur materiałowych pozwalający na pewne porównanie otrzymanych wyników.

Należy zaznaczyć, że tylko część wyników pracy została dotychczas opublikowana. Jako prace związane bezpośrednio z rozprawą doktorską Doktorant wymienia 4 publikacje. Są to publikacje wieloautorskie (w tym samym składzie autorów). We wszystkich tych publikacjach Doktorant jest pierwszym autorem. Warto podkreślić, że dwie z tych publikacji to publikacje za 140 pkt. (*Scientific Reports*), a jedna za 100 pkt. (*IEEE Photonics Journal*). Bezpośrednio z recenzowaną rozprawą związane są też 3 opublikowane komunikaty konferencyjne i 5 innych wystąpień konferencyjnych. Oprócz tego Doktorant informuje w rozprawie o zaawansowanych pracach nad dwiema nowymi publikacjami i planowanej trzeciej. Przedstawiony dorobek publikacyjny nie jest oszałamiający, ale jest przyzwoity jak na doktoranta i, co ważne, są realne perspektywy na jego zwiększenie.

Praca doktorska Pana mgr inż. Herberta Mączki jest w ogólności napisana poprawnie. Jest to praca zarówno merytorycznie dobra, jak i pod względem jej czytelności. Układ pracy jest logiczny, a przypisy literaturowe poprawnie dobrane (mamy łącznie 160 pozycji literaturowych). Autor nie ustrzegł się jednak pewnych uchybień. Jednym z podstawowych edytorskich mankamentów pracy (bardzo denerwujących podczas czytania) jest permanentny brak stosowania twardych spacji. Niemal co chwila w rozprawie mamy linijki tekstu, w których na samym końcu występuje np. „. W”, a cała dalsza część zdania jest w następnej linijce. Jest też sporo literówek np. „znaczniej ilości”, „Poprzez odjęci”, „Procedure”, „analizowani” itd. Występują też powtórzenia jak np. „na podstawie na podstawie”, „macierzowych macierzowych” itd., a także błędy ortograficzne np. „z godnie”, „po przez”. W niektórych miejscach brak litery może być mylący dla czytelnika i ma znaczenie

merytoryczne np. „GeS” zamiast GeSe. Należy jednak zaznaczyć, że przytoczone błędy edytorskie nie wpływają znacząco na czytelność i stronę merytoryczną rozprawy.

Zastanawiający jest tytuł rozprawy *Obliczenia struktury pasmowej i wzmocnienia optycznego dla części aktywnej nowoczesnych laserów półprzewodnikowych*. Jestem przekonany, że bez przeczytania choćby wstępu do pracy nikt na podstawie tego tytułu nie będzie w stanie odpowiedzieć na pytanie, o jakie niby lasery chodzi.

Autor rozprawy stara się umieszczać przypisy do informacji zawartych w rozprawie. Istnieje jednak pewna niekonsekwencja w tym działaniu. Na przykład w rozdziałach 2.3.1, 2.3.5 i 2.5 czytelnik może się zastanawiać, czy przytoczone zależności są autorstwa Doktoranta czy to znane formuły z literatury. Podobnie zresztą sprawa się ma z rozdziałami 4.2.3 i 4.2.4 dotyczącymi parametrów materiałów BAs i BP. Rozprawa opiera się na modelach i programach komputerowych. Niestety nie jest jasne, czy te programy są autorstwa Doktoranta czy zostały opracowane przez kogoś innego. W szczególności czytając końcówkę rozdziału 2 pt. „Modele i schematy” nie znajduje się informacji, czy w pracy wykorzystano autorskie algorytmy obliczeniowe Doktoranta, a jeśli tak, to czy i jakie są tu istotne nowości i co one wnoszą.

Rozdział 3 („Analiza modeli”) jest bardzo ciekawy. Wydaje się jednak, że gdyby Doktorant wybrał do porównania modeli bardziej powszechne materiały optoelektroniczne jak np. GaAs zamiast Ge, który nie jest materiałem typowo optoelektronicznym, to po pierwsze dostalibyśmy dużo bardziej przydatne porównanie, a po drugie korzystalibyśmy przy tym z ogromnej bazy zebranych i pewnych danych materiałowych i doświadczalnych umożliwiające dużo pewniejsze porównania. Pojawia się też inne pytanie. Czy wnioski z rozdziału 3 można przełożyć na inne (bardziej powszechne) optoelektroniczne systemy materiałowe?

Jednym z podstawowych wyzwań dla prac teoretycznych opartych na modelowaniu komputerowym jest propozycja zestawu parametrów materiałowych (często nieznanymi lub słabo znanymi) i parametrów modelu. Uwarunkowania są takie, że trudno zarzucać Doktorantowi, że opiera po części swoje prace teoretyczne na innych pracach teoretycznych. Jednak dziwi, że w takim wydawnictwie jak rozprawa doktorska, które powinno być spójną publikacją, parametry dla niektórych podstawowych materiałów jak np. Ge czy α -Sn są różne w różnych częściach pracy (np. w tablicach 4.1 i 4.2).

Uważam, że praca dużo by zyskała, gdyby Doktorant przedstawił więcej szczegółów dotyczących samych laserów półprzewodnikowych, których obszary czynne modeluje. Chodzi zarówno o konkretne dane co do ich aktualnych parametrów pracy jak i o rysunki konkretnych rozwiązań konstrukcyjnych. Laser półprzewodnikowy to nie tylko sama warstwa czynna, ale także falowód, warstwy ograniczenia optycznego, warstwy podkontaktowe itd. Wszystko to ma wpływ na działanie przyrządu, w szczególności na możliwości uzyskania odpowiedniego wzmocnienia optycznego. Tymczasem w większości pracy pomija się np. potrzebę uzyskania w strukturze lasera zarówno warstwy aktywnej jak i warstwy falowodowej oraz warstwy ograniczenia optycznego. Dopiero taki układ warstw umożliwia właściwe modelowanie wzmocnienia materiałowego. Z tym tematem wiąże się następny problem pomijany w rozprawie. Jaka powinna być faktycznie wartość materiałowego

wzmocnienia optycznego, aby mogła zajść akcja laserowa w analizowanych przyrządach? Sama dodatnia wartość wzmocnienia (takie stwierdzenie pojawia się w rozprawie) nie jest tu warunkiem wystarczającym.

Jednym ze słabszych punktów rozprawy doktorskiej jest pominięcie wpływu zmian temperatury na położenie i wartość wzmocnienia rozważanych obszarów czynnych. Wszystkie analizy przeprowadzone zostały dla temperatury 300 K. Pamiętajmy jednak, że o działaniu lasera np. wzbudzeniu i zaniku akcji laserowej decyduje w wielu przypadkach właśnie spadek i przesunięcie spektrum wzmocnienia wywołane wzrostem temperatury obszaru czynnego podczas pracy przyrządu. W przypadku przedstawionych w rozprawie wyników jest to o tyle istotne, że Doktorant zakłada bardzo duże koncentracje nośników w obszarze czynnym (rzędu 10^{19} czy 10^{20} cm^{-3}). Uzyskanie takich koncentracji wymaga dużych prądów, a to z kolei wywołuje duże wzrosty temperatury w strukturze laserowej. Myślę, że warto w następnych pracach wykonać taką analizę.

Patrząc na rysunki 5.36 i 5.37 oraz 5.29 i 5.31 odnosi się wrażenie, że dla tych samych zestawów parametrów i tych samych składów materiałowych mamy zupełnie inne wartości wzmocnienia. Warto wyjaśnić tą sprawę.

Podsumowując, uważam, że wspomniane wyżej niejasności oraz usterki redakcyjne nie mają jednak wpływu na moją pozytywną ocenę całej recenzowanej rozprawy. W mojej opinii rozprawa jest bardzo wartościowa i wnosi znaczącą wiedzę w temacie projektowania obszarów czynnych laserów półprzewodnikowych bazujących na materiałach GeSn/Ge, GeSn/SiGeSn czy BGeAs/GaP. Rozprawa spełnia wszystkie zarówno zwyczajowe, jak i ustawowe wymagania stawiane pracom doktorskim, w szczególności pracom doktorskim w dyscyplinie nauki fizyczne. Wnioskuje więc o dopuszczenie mgra inż. Herberta Mączki do publicznej obrony pracy.

Robert Sarzała



