



Uniwersytet Warszawski

Wydział Fizyki

Jacek A. Majewski



Ul. L. Pasteura 5, 02-093 Warszawa, tel.: (0-22)5532924,

e-mail: [jacek.majewski@fuw.edu.pl](mailto:jacek.majewski@fuw.edu.pl)

Warszawa, 9 września 2017

### Recenzja pracy doktorskiej pana mgr Konrada Sakowskiego

Praca doktorska pana mgr Konrada Sakowskiego zatytułowana **“Determination of the properties of the nitride laser diodes and light-emitting diodes by simulation based on the drift-diffusion model with the Discontinuous Galerkin Method”** jest poświęcona równaniom dryfu-dyfuzji (ang. drift-diffusion equations), opisujących transport ładunków elektrycznych w półprzewodnikach, z punktu widzenia badania ich matematycznej struktury, opracowania efektywnej metody ich rozwiązania, oraz zastosowaniu opracowanego algorytmu do przewidywania własności półprzewodnikowych przyrządów optoelektronicznych, diod laserowych i elektroluminescencyjnych opartych na heterostrukturach azotkowych. Rozprawa nosi charakter interdyscyplinarny łącząc elementy matematyczne, informatyczne i fizyki urządzeń elektronicznych. Największym osiągnięciem Rozprawy z punktu widzenia fizyka teoretyka jest opracowanie efektywnej metody rozwiązania równań dryfu i dyfuzji działającego zadawalająco w przypadku materiałów azotkowych. Zanim przedstawię szczegółową analizę Rozprawy, chciałbym podkreślić, że jest to bardzo dobra praca zawierająca nowe i interesujące wyniki oraz wnosząca znaczący wkład do metodyki teoretycznych badań nad fizyką urządzeń elektronicznych.

Bardzo obszerna, napisana w języku angielskim, Rozprawa (liczy 230 stron sformatowanych w sposób pozwalający na zawarcie 4800 znaków na stronie) składa się z krótkiego wstępu, trzech rozdziałów, dodatku, oraz bibliografii. Do rozprawy dołączono krótkie streszczenie w języku polskim i angielskim zawierające również wykaz publikacji doktoranta związanych z materiałem przedstawionym w Rozprawie oraz inne osiągnięcia publikacyjne doktoranta. We wstępie w zwięzły sposób przedstawiono: motywację prowadzącą do podjęcia tematyki badawczej, tezę pracy, nowe opracowania metodologiczne zastosowane w pracy, uzasadnienie wyboru metody badawczej, oraz podstawowe wyniki pracy. W Rozdziale 1, stanowiącym główną część matematyczną, przedstawiono matematyczne sformułowanie problemu równań dryfu-dyfuzji (nazywanych w Rozprawie, od autora pierwszej pracy na ten temat, równaniami van Roosbroecka) oraz opis ich dyskretyzacji w ramach złożonej Nieciągłej Metody Galerkina. Złożona Nieciągła Metoda Galerkina charakteryzuje się wprowadzeniem dwóch sieci, gęstej oraz grubej, na elementach której stosuje się ciągłą Metodę Elementu Skończonego (ang. Finite Element Method). W Rozprawie zastosowano geometryczne formy sieci odpowiednie do struktury geometrycznej badanych w dalszej części pracy heterostruktur azotkowych. W pracy przedstawiono szczegóły dyskretyzacji dla

przypadku równania Poissona. Jak można przypuszczać dyskretyzacja dwóch równań prądowych należących do zbioru trzech równań dryfu-dyfuzji została przeprowadzona w sposób analogiczny. Równanie Poissona jest o tyle ważne, że system równań dryfu-dyfuzji redukuje się do tego równania w przypadku układu w równowadze, tzn. bez zewnętrznego napięcia przyłożonego do końców układu heterostruktur. W dalszej części Rozdziału 1 przedstawiono formalizm pozwalający na oszacowanie normy błędu rozwiązań dyskretnych. W rozumieniu recenzenta, ta część Rozdziału 1 stanowi największe matematyczne osiągnięcie Rozprawy. Opisaną metodykę dyskretyzacji równań dryfu-dyfuzji została zaimplementowana w kodzie numerycznym napisanym przez doktoranta. Wyniki symulacji dla optoelektronicznych urządzeń azotkowych oraz porównanie wyników otrzymanych za pomocą własnego kodu z rozwiązaniami otrzymanymi w ramach innych kodów dla rozwiązań równań dryfu-dyfuzji przedstawiono w Rozdziale 2.

W podrozdziałach 2.1-2.7 Rozdziału 2 (strony 70-104) przedstawiono podstawowe w przeważającej części książkowe fakty dotyczące: (i) struktury elektronowej azotków galu, glinu i indu wchodzących w skład heterostruktur azotkowych stanowiących materiałowe podstawy badanych urządzeń, (ii) czasami stosowane i grube przybliżenie dotyczące własności układów stopowych, (iii) równania dryfu-dyfuzji w sformułowaniu powszechnym dla inżynierii i fizyki przyrządów półprzewodnikowych, (iv) modele rekombinacji, która pełni rolę źródła w równaniach prądowych. Tutaj chciałbym zwrócić uwagę, że zwyczajowo człony źródłowe w równaniach prądowych są uwzględniane w postaci funkcji opisującej generację ( $G$ ) i rekombinację ( $R$ ) nośników. W równaniach (2.5.24) oraz (2.5.27) generacja nośników została pominięta, zapewne ze względu na fakt, że w symulacjach numerycznych nie rozważano fizycznych efektów takich, jak jonizacja zderzeniowa (ang. impact ionization) czy adsorpcja światła, prowadzących do generacji nośników. Oczywiście efekty generacji nośników mogą zostać zawarte w 'zrenormalizowanej' funkcji  $R$ . Rozumiem, że umieszczając w Rozprawie materiał zawarty w podrozdziałach 2.1-2.7 doktorant kierował się chęcią przybliżenia problemu dyfuzyjnego transportu w urządzeniach półprzewodnikowych czytelnikom, dla których te zagadnienia są całkowicie obce. Omawiając zawartość podrozdziałów 2.1-2.7 chciałbym również wyrazić zdziwienie, że poświęcając tyle miejsca dość trywialnej materii, nie zademonstrowano wyprowadzenia równań dryfu-dyfuzji z równania transportowego Boltzmanna, co można znaleźć w wielu typowych podręcznikach fizyki półprzewodników. Dodatkowe dwie-trzy strony pozwoliłyby czytelnikowi na ocenę skali przybliżeń dokonanych na drodze do równań dryfu-dyfuzji.

W podrozdziałach 2.8-2.9 przedstawiono bardzo szczegółowo wyniki symulacji dla struktur azotkowych o różnym stopniu komplikacji, traktując je zasadniczo jako struktury jednowymiarowe. Wydaje się, że nawet dla najbardziej skomplikowanych struktur rozważanych w rozprawie opracowana metoda dyskretyzacji zastosowana w kodzie numerycznym doktoranta prowadzi do stabilnych rozwiązań, co nie jest powszechne w różnych kodach rozwiązujących równania dryfu-dyfuzji dla struktur azotkowych. Bez wątpienia jest to duże osiągnięcie Rozprawy. W podrozdziale 2.8.3 porównano wyniki symulacji otrzymanych dla azotkowych diod  $p-n$  przy pomocy kodu doktoranta z wynikami otrzymanymi przy pomocy dwóch wybranych z całej plejady kodów *SimWindows* oraz

*SiLENSe*. Ze względu na różnice w stosowanej metodologii oraz liczbę rozmaitych przybliżeń czynionych w różnych kodach bezpośrednie porównanie otrzymanych wyników nie jest proste. Niemniej doktorant poczynił próby standaryzacji problemu i przeprowadził symulacje. Kogoś kto miał już do czynienia z wynikami symulacji dla identycznego problemu fizycznego przeprowadzonymi przy pomocy różnych kodów nie dziwi fakt, że również w niniejszej pracy zaobserwowano różnice.

W Rozdziale 3 przedstawiono szczegóły techniczne rozwiązania silnie nieliniowych równań dryfu-dyfuzji w przypadku struktur azotkowych oraz analizę błędów. Ważnym wynikiem tego rozdziału jest stwierdzenie, że zmodyfikowana metoda Newtona okazuje się najbardziej stabilną dla tych struktur. Przedstawiono też w bardzo ograniczonej formie, jak wprowadzony sposób dyskretyzacji równań dryfu-dyfuzji funkcjonuje w przypadku układów dwuwymiarowych. W sposób bardziej szczegółowy zostały przedstawione problemy nieciągłości wielkości fizycznych na interfejsach, jakkolwiek tylko dla problemów jednowymiarowych.

Rozdział 4 stanowi Appendix, będący uzupełnieniem Rozdziału 1, w którym zawarto jednak ważne dla Rozprawy treści, takie jak problem istnienia dyskretnych rozwiązań w przypadku problemu jednowymiarowego. Rozprawa zawiera również bibliografię liczącą 125 pozycji, w której znajdują najważniejsze prace dotyczące badanego zagadnienia.

Struktura Rozprawy jest bardzo logiczna. Materiał jest przedstawiony w sposób jasny i zrozumiały, grafiki są dobrej jakości a matematyczne wyrażenia starannie wypisane. Może przydałoby się zakończenie z podsumowaniem wyników osiągniętych w pracy i perspektywami dalszego kontynuowania rozpoczętej pracy, a te zdaniem recenzenta są duże. Praca jest napisana zrozumiałym językiem angielskim. Co prawda można znaleźć sformułowania raczej dziwne dla fizyka, jak na przykład na stronie 32 „At opposite ends of the device metal contacts are attached, to which the current can be applied”. Normalnie mówimy, że do kontaktów przyłożone zostaje napięcie elektryczne (wprowadzona różnica potencjałów na kontaktach) a nie prąd, i taka sytuacja była modelowana w Rozprawie.

W opinii recenzenta, przedstawiona Rozprawa stanowi duże osiągnięcie badawcze Doktoranta. **Zasadniczym osiągnięciem jest sformułowanie metody rozwiązania równań dryfu-dyfuzji**, które prowadzi do stabilnych rozwiązań dla urządzeń optoelektronicznych opartych o heterostruktury azotkowe.

Wiele istniejących na rynku kodów numerycznych, bezproblemowo funkcjonujących dla optoelektronicznych struktur arsenowych, nie jest w stanie dostarczyć fizycznych rozwiązań równań dryfu-dyfuzji dla struktur azotkowych. Jest to niewątpliwie związane z dużą przerwą energetyczną azotków i dużo większą skalą wielkości fizycznych występujących w równaniach. Jak trudnym problemem jest transport w układach azotkowych świadczy między innymi praca magisterska wykonana na Wydziale Fizyki UW we współpracy z IWC PAN, gdzie wykonano symulacje urządzeń azotkowych, analogicznych do badanych w Rozprawie używając dwóch kodów komercyjnych *SiLENSe* oraz *LASTIP* (firmy Cross Light). Dla pewnych struktur wyniki otrzymane przy pomocy tych kodów różniły się nie tylko ilościowo

ale wskazywały na całkowicie różne jakościowo zjawiska. Fakt, że jeden z tych kodów jest kilkadziesiąt razy droższy od drugiego nie pozwala stwierdzić, które rozwiązania są poprawne. Dlatego istnienie innych stabilnych metod rozwiązania równań dryfu-dyfuzji dla struktur azotkowych ma niezwykle istotne znaczenie dla znalezienia w końcu ich poprawnych rozwiązań.

Warto nadmienić, że porównanie z danymi eksperymentalnymi nie jest tutaj zasadnicze, ponieważ stosowanie równań dryfu-dyfuzji (w czystej formie) do opisu transportu w azotkowych urządzeniach optoelektronicznych znacznie odbiega od fizycznego obszaru ich ważności. W strukturach azotkowych efekty kwantowe (całkowicie zaniedbane w równaniach dryfu-dyfuzji) takie, jak na przykład efekty tunelowania nośników pomiędzy studniami, czy przejścia pomiędzy-dolinowe spowodowane rozpraszaniem na fononach optycznych, odrywają ważną rolę i powinny zostać uwzględnione w opisie transportu w tych strukturach. Jakkolwiek trudno jest krytykować rozwiązania oparte na czysto klasycznym opisie transportu, jaki dają równania dryfu-dyfuzji, jeżeli tak naprawdę rozwiązania tych równań nie są znane. Zdaniem recenzenta, praca mgr K. Sakowskiego przybliżyła nas do znalezienia takich ścisłych rozwiązań i pokazuje, że szukanie takich rozwiązań jest dobrze postawionym problemem matematycznym.

Jakkolwiek w Rozprawie zastosowano raczej proste i ograniczone podejście do równań dryfu-dyfuzji, np. zakładając (strona 85) liniową zależność pomiędzy prędkością dryfu a polem elektrycznym, podczas gdy wiadomo, że w silnych polach panujących w strukturach azotkowych, prędkość dryfu ma tendencję do nasycenia. Uwzględniono też tylko niezdegenerowaną Boltzmann'owską statystykę nośników, co przy ich dużej koncentracji i obecności studni kwantowych w rozpatrywanych strukturach nie zawsze jest prawdziwe. Również metoda dyskretyzacji została wyspecyfikowana do niezwykle prostej geometrii układu, gdzie transport zachodzi w jednym kierunku prostopadle do lateralnie jednorodnych równoległych do siebie warstw materiałów. Już przypadek jednowymiarowego transportu w drucie kwantowym prowadzi do bardziej skomplikowanej geometrii. Niemniej, zastosowana w Rozprawie metodologia może być rozszerzona na ogólniejsze przypadki transportu dyfuzyjnego. Również dołączenie do 3 rozważanych równań dryfu-dyfuzji (odpowiadających zerowemu i pierwszemu momentowi funkcji rozkładu) równania opisującego przepływ ciepła w strukturze (odpowiadającego drugiemu momentowi funkcji rozkładu) nie powinno przedstawiać większych trudności. Ogólnie, zdaniem recenzenta, metodologia zastosowana w Rozprawie ma duży potencjał rozwojowy.

Ogólnie, oceniam Rozprawę jako bardzo dobrą. Doktorant wykazał się umiejętnością sprawnego posługiwania się różnymi metodami teoretycznymi, umiejętnością krytycznej oceny otrzymanych wyników, oraz dobrą znajomością badanego zagadnienia. Rozprawa zawiera nowe wartościowe wyniki oraz demonstrowa potencjał złożonej Nieciągłej Metody Galerkina do znajdowania dyskretnych rozwiązań nieliniowych układów równań różniczkowych. Opracowana w Rozprawie metodologia oraz uzyskane doświadczenie mogą znaleźć zastosowanie w badaniu innych problemów fizyki obliczeniowej.

Zdaniem recenzenta przedstawiona Rozprawa całkowicie spełnia wymagania ustawy i jednoznacznie kwalifikuje Doktoranta do otrzymania stopnia doktora, w związku z czym **wnoszę o dopuszczenie pana mgr Konrada Sakowskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

Oceniając dorobek naukowy Doktoranta, nie sposób nie odnieść się do dużego na tym etapie kariery naukowej dorobku publikacyjnego. Wyniki osiągnięte w pracy doktorskiej zostały przedstawione w 7 publikacjach, a pan Konrad Sakowski dodatkowo uczestniczył w pracach badawczych (głównie obliczenia *ab initio* dla struktur azotkowych) prowadzonych w Instytucie Wysokich Ciśnień PAN, czego efektem było współautorstwo w 16 publikacjach. Biorąc pod uwagę niezwykle ważne osiągnięcie pracy doktorskiej, jej interdyscyplinarny charakter, oraz dorobek publikacyjny Doktoranta, **wnoszę o wyróżnienie Rozprawy doktorskiej pana mgr Konrada Sakowskiego.**

Z poważaniem



Prof. dr hab. Jacek A. Majewski