

AUTOREFERAT

dr inż. Piotr Borowik

Warszawa, 2018

Spis treści

1.	Wykształcenie i doświadczenie zawodowe.....	2
2.	Przebieg dotychczasowej działalności naukowo-badawczej.....	3
2.1	Działalność naukowo-badawcza przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora.....	3
2.2	Działalność naukowo-badawcza po uzyskaniu stopnia naukowego doktora.....	3
3.	Osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego.....	4
3.1	Wykaz publikacji wchodzących w skład osiągnięcia naukowego.....	4
3.2	Wybrane wyniki prac składających się na przedstawione osiągnięcie naukowe oraz możliwości ich wykorzystania.....	6
3.2.1	Wstęp do tematyki pracy naukowo-badawczej.....	6
3.2.2	Metody Monte Carlo pozwalające na modelowanie transportu elektronów z uwzględnieniem efektów związanych z zakazem Pauliego.....	7
3.2.2.1	Dla oddziaływań elektron-fonon.....	9
3.2.2.2	Dla oddziaływań kulombowskich elektron-elektron.....	10
3.2.2.3	Znaczenie i możliwości wykorzystania uzyskanych wyników.....	11
3.2.3	Zastosowania symulacji Monte Carlo do modelowania własności elektronowych materiałów dwuwymiarowych.....	12
3.2.3.1	Badania własności transportu elektronów w grafenie i silicenie.....	12
3.2.3.2	Badanie relaksacji spinowo spolaryzowanego gazu elektronowego w grafenie.....	14
3.2.3.3	Badania relaksacji wzbudzonych elektronów w spinowo spolaryzowanym gazie elektronowym w grafenie.....	17
3.2.3.4	Znaczenie i możliwości wykorzystania wyników dotyczących modelowania materiałów dwuwymiarowych.....	20
3.2.4	Modelowanie Monte Carlo kwantowych laserów kaskadowych.....	21
3.2.4.1	Wybrane wyniki modelowania.....	22
3.2.4.2	Znaczenie i możliwości wykorzystania wyników dotyczących modelowania kwantowych laserów kaskadowych.....	25
3.3	Podsumowanie wyników składających się na prezentowane osiągnięcie naukowe.....	27
4.	Inne osiągnięcia naukowo badawcze.....	30
4.1	Inne prace opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora.....	30

4.1.1	W czasopismach znajdujących się w bazie JCR	30
4.1.2	W innych czasopismach	30
4.1.3	Główne wyniki innych prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora	30
4.2	Prace opublikowane w czasopismach znajdujących się w bazie JCR, przed uzyskaniem stopnia doktora	31
4.3	Wystąpienia i plakaty na konferencjach naukowych po uzyskaniu stopnia doktora	32
4.3.1	Prezentowane osobiście	32
4.3.2	Prezentowane przez współautorów	33
4.4	Udział w projektach badawczych	33
4.5	Recenzowanie artykułów w czasopismach naukowych	35
4.6	Działalność dydaktyczna i zawodowa	35
5.	Literatura	36

1. Wykształcenie i doświadczenie zawodowe

dr inż. Piotr Borowik

Magister inżynier fizyki technicznej, specjalność optoelektronika, Politechnika Warszawska, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, 1994

Tytuł pracy: *Zastosowanie metody Monte Carlo do badania transportu elektronów w strukturze półprzewodnikowej typu HEMT*

Promotor: dr Wojciech Gębicki,

Recenzent: prof. Maciej Bugajski

Doktor nauk fizycznych w zakresie fizyki, Politechnika Warszawska, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, Instytut Fizyki, 1998

Tytuł pracy: *Monte Carlo study of electron transport in highly doped GaAs*

Promotor: prof. Leszek Adamowicz

Recenzenci: prof. Maciej Bugajski, prof. Andrzej Sukiennicki, prof. Renaud Fauquembergue

Praca została wykonana w ramach współpracy naukowej z Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord, Université des Sciences et Technologies de Lille, France, opiekun naukowy: dr Jean-Luc Thobel. Praca uznana za wyróżniającą.

Zatrudnienie: W trakcie mojej kariery zawodowej nie byłem zatrudniony w instytucjach naukowo-badawczych. Od czasu uzyskania tytułu doktora zawodowo zajmuję się technologiami informatycznymi. Od 2001 roku pracuję w SAS Institute, obecnie na stanowisku *Principal Systems Engineer, Architecture Practice Leader*.

2. Przebieg dotychczasowej działalności naukowo-badawczej

2.1 Działalność naukowo-badawcza przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

Moje pierwsze zetknięcie się z wykorzystaniem metod Monte Carlo (MC) miało miejsce w trakcie pisania przeze mnie pracy magisterskiej. Wiązało się to z nawiązaniem współpracy naukowej z zespołem prof. R. Fauquembergue, a szczególnie z dr. Jean-Luc Thobel z Institut d'Electronique de Microélectronique et de Nanotechnologie, Université des Sciences et Technologies de Lille we Francji. Współpraca ta trwa do dzisiaj.

Jednym z głównych celów nawiązanej wówczas współpracy była chęć rozszerzenia zakresu tematyki badawczej Wydziału Fizyki Politechniki Warszawskiej. Tematyka związana z wykorzystaniem metod MC do rozwiązywania zagadnień znajdujących się na styku fizyki ciała stałego oraz elektroniki nie była wcześniej obecna w problematyce badawczej Wydziału.

W latach 1994-1998 byłem uczestnikiem studiów doktoranckich w Instytucie Fizyki Politechniki Warszawskiej. W tym czasie, w ramach programu wymiany studentów TEMPUS, oraz dzięki uzyskanemu Stypendium Rządu Francuskiego, łącznie przez 2 lata przebywałem na Uniwersytecie w Lille.

2.2 Działalność naukowo-badawcza po uzyskaniu stopnia naukowego doktora

Po uzyskaniu przeze mnie stopnia doktora podjąłem pracę zawodową w dziedzinie informatyki, poza instytucjami akademickimi i naukowo-badawczymi. Od 2001 roku jestem zatrudniony w SAS Institute, firmie produkującej i wdrażającej oprogramowanie do przetwarzania i analizy danych (www.sas.com).

Tym niemniej, trudno mi było całkowicie zrezygnować z udziału w rozwijaniu interesującej mnie problematyki badawczej zapoczątkowanej w pracy doktorskiej. Mimo obowiązków w pracy zawodowej, udawało mi się w czasie wolnym kontynuować współpracę z prof. L. Adamowiczem z Wydziału Fizyki Politechniki Warszawskiej oraz dr. J. L. Thobel z Instytutu Elektroniki, Mikroelektroniki i Nanotechnologii Uniwersytetu Lille 1 we Francji.

Początkowo była to kontynuacja badań rozpoczętych w trakcie studiów doktoranckich, związanych z wykorzystaniem metody MC do badania dyfuzji w zdegenerowanym gazie elektronowym.

Następnie zainteresowała mnie tematyka związana ze spinem elektronowym, tzw. spintronika. Wziąłem udział w realizacji grantu badawczego dotyczącego spintroniki, wykonywanego częściowo na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej, a także uczestniczyłem w opiece naukowej nad dwojgiem studentów przygotowujących prace magisterskie.

Następnie zaobserwowałem, że wiele zespołów zajmujących się symulacjami MC transportu elektronowego w półprzewodnikach i urządzeniach mikroelektronicznych zainteresowało się modelowaniem struktur kwantowych laserów kaskadowych (quantum cascade lasers – QCL). Jednym z takich zespołów była grupa dr. Thobela. Podtrzymywane kontakty naukowe oraz wiedza i doświadczenie zdobyte na Uniwersytecie w Lille pozwoliły mi włączyć się w te badania. Dodatkowym impulsem do zajmowania się tą tematyką była użyteczność tych prac dla zespołu eksperymentatorów pracujących w Warszawie. Po pewnym czasie zaowocowało to udziałem w zamawianym grantie

badawczym, którego jednym z celów było opanowanie technologii wytwarzania tego typu laserów w Instytucie Technologii Elektronowej w Warszawie.

Od kilku lat można zauważyć zmianę charakteru prac badawczych dotyczących kwantowych laserów kaskadowych. Związane jest to dwoma czynnikami. Po pierwsze sukces związany z budową laserów pracującymi w obszarze średniej podczerwieni sprawił, że przeszły one od stadium badań podstawowych na pograniczu elektroniki i fizyki, do etapu badań nad optymalizacją działających już konstrukcji, praktycznego wykorzystania i produkcji komercyjnej. Po drugie nie udało się uzyskać znacznego podniesienia temperatury działania laserów emitujących w obszarze terahercowym, powyżej temperatury około 200K [Fatholouloumi 2012].

W związku z powyższym, doszedłem do przekonania, że z punktu widzenia badań podstawowych i możliwości wykorzystania rozwijanych przeze mnie metod Monte Carlo, bardziej uzasadnione będzie zajęcie się tematyką materiałów zbudowanych z pojedynczej warstwy atomów, tzw. materiałów dwuwymiarowych (2D), takich jak grafen i silicen. Tematyka ta jest obecnie intensywnie rozwijana w badaniach doświadczalnych i teoretycznych. W ciągu ostatnich kilku lat zajmowałem się modelowaniem MC transportu elektronów oraz efektów związanych z polaryzacją spinową w tych nowych materiałach 2D.

3. Osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego

Osiągnięciem naukowym zgodnie z *art. 16. Ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. 2016 r. poz. 882 ze zm. W Dz. U. z 2016 r. poz. 1311.)* jest jednotematyczny cykl 10 prac opublikowanych w latach 2005–2018 w czasopiśmie z listy *Journal Citation Report*.

Wspólnym tytułem dla przedstawionego cyklu jest:

Zastosowania metody Monte Carlo do badania transportu elektronowego w materiałach dwuwymiarowych i strukturach kwantowych

3.1 Wykaz publikacji wchodzących w skład osiągnięcia naukowego

- [A1] **P. Borowik**, L. Adamowicz, *Improved algorithm for Monte Carlo studies of electron transport in degenerate semiconductors*, *Physica B*, 365, 235–239 (2005), IF₂₀₀₅=0.796 [95%]
- [A2] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo based microscopic description of electron transport in GaAs/Al_{0.45}Ga_{0.55}As quantum-cascade laser structure*, *Journal of Applied Physics*, 108, 073106 (2010), IF₂₀₁₀=2.064 [90%]
- [A3] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Combined rate equation and Monte Carlo studies of electron transport in a GaAs/Al_{0.45}Ga_{0.55}As quantum-cascade laser*, *Semiconductor Science and Technology*, 27, 115005 (2012), IF₂₀₁₂=1.723 [90%]

- [A4] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo modeling applied to studies of quantum cascade lasers*, *Optical and Quantum Electronics*, 49, 96 (2017), IF₂₀₁₇=1.168 [85%]
- [A5] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo studies of low-field electron transport in monolayer silicene and graphene*, *Physica Status Solidi A*, 213, 2916-2920 (2016), IF₂₀₁₆=1.775 [90%]
- [A6] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo study of electron transport in monolayer silicene*, *Semiconductor Science and Technology*, 31, 115004 (2016), IF₂₀₁₆=2.305 [90%]
- [A7] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Modified Monte Carlo method for study of electron transport in degenerate electron gas in the presence of electron–electron interactions, application to graphene*, *Journal of Computational Physics*, 341, 397-405 (2017), IF₂₀₁₇=2.864 [90%]
- [A8] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo method for studies of spin relaxation in degenerate electron gas: Application to monolayer graphene*, *Journal of Applied Physics*, 122, 045704 (2017), IF₂₀₁₇=2.176 [85%]
- [A9] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo study of electron relaxation in graphene with spin polarized, degenerate electron gas in presence of electron-electron scattering*, *Semiconductor Science and Technology*, 32, 125006 (2017), IF₂₀₁₇=2.280 [85%]
- [A10] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo studies of thermalization of electron-hole pairs in spin polarized degenerate electron gas in monolayer graphene*, *Applied Physics A*, 124, 184 (2018) IF₂₀₁₇=1.604 [85%]

W wykazie podany jest *impact factor* czasopisma w roku publikacji. Dla artykułu publikowanego w 2018 roku wskaźnik ten nie jest jeszcze dostępny, podana jest więc wartość z roku 2017. W nawiasach kwadratowych podaję ocenę mojego udziału w powstanie danej pracy.

Jestem pomysłodawcą i głównym wykonawcą przedstawionych prac. Mój udział w powstaniu każdej z nich, zgodnie z deklaracjami współautorów, przewyższa 80%. Bardziej szczegółowe informacje na temat mojego wkładu znajdują się w Załączniku nr 4 do wniosku. Oświadczenia współautorów o udziale w wymienionych pracach zostały zamieszczone w Załączniku nr 5 do wniosku. **Podobnie decydujący udział miałem w powstaniu wszystkich innych prac, opublikowanych w czasopismach z listy JCR, składających się na mój dorobek naukowy.**

W tym miejscu chciałbym wyjaśnić, dlaczego nie pełnię roli autora korespondującego. Powód jest czysto formalny i wynika z nietypowej sytuacji mojego zatrudnienia w instytucji komercyjnej. Ponieważ jedynie gościnnie korzystam z możliwości publikacji z afiliacją Wydziału Fizyki Politechniki Warszawskiej, współautorzy zatrudnieni w instytucjach akademickich zgodzili się wyręczać mnie w tej roli.

3.2 Wybrane wyniki prac składających się na przedstawione osiągnięcie naukowe oraz możliwości ich wykorzystania

3.2.1 Wstęp do tematyki pracy naukowo-badawczej

Modelowanie i symulacje komputerowe stały się jednym ze sposobów na poszerzenie naszej wiedzy w wielu dziedzinach nauki, w tym również w naukach technicznych. Podejście to bazuje na wynikach eksperymentalnych oraz teoretycznych i stanowi ich uzupełnienie, często pozwalając na otrzymanie wyników nieosiągalnych w inny sposób. Symulacje komputerowe pozwalają na uzyskanie opisu zarówno jakościowego, jak też ilościowego dla wielu zagadnień, które są zbyt złożone aby można było otrzymać wyniki analityczne, lub też uzyskanie wyników eksperymentalnych jest trudne lub bardzo kosztowne. Ważnym polem, na którym wykorzystywane są tego typu metody jest między innymi styk fizyki, elektroniki i badań materiałowych. Poszukiwanie i ulepszenia metod modelowania pełnią rolę służebną, rozwoju narzędzi, których rola jest trudna do przecenienia.

Zakres prowadzonych przeze mnie badań zawiera się w obszarze elektroniki i fizyki obliczeniowej i skupia się głównie na rozwijaniu metody Monte Carlo oraz przystosowywaniu jej do badania transportu elektronowego w materiałach i strukturach używanych w elektronice. Metoda ta z powodzeniem używana jest jako jedno z głównych narzędzi teoretycznych w tych dziedzinach [Lugli 1989] a jej charakterystyce dobrze odpowiada określenie „eksperymenty numeryczne”. Zespoły podejmujące podobne tematy identyfikują się również często elektroniką jak też z fizyką. Podobna tematyka interesuje również matematyków – których fascynuje sama struktura matematyczna praw fizyki. Przykładem może być medal Fieldsa, który został przyznany w roku 2010 Cedricowi Villaniemu między innymi za dowód zbieżności do stanu stacjonarnego rozwiązań równania Boltzmanna. Równanie Boltzmanna ma fundamentalne znaczenie dla teorii chaosu, stanowi też punkt wyjścia do teoretycznego uzasadnienia podstawowych równań mechaniki płynów (równania Naviera-Stokesa i przewodnictwa cieplnego).

Ważną zaletą stosowanych metod jest to, że pozwalają one na uzyskanie wyników często porównywalnych z bardziej złożonymi metodami takimi jak np. nierównowagowe funkcje Greena. Przy czym, symulacje MC są znacznie łatwiejsze do przeprowadzenia dla różnych warunków, a uzyskiwane wyniki pozwalają na przystępną interpretację. Niebagatelne znaczenie ma też to, że zwykle jedynymi parametrami wejściowymi do modelowania są stałe materiałowe, które mogą być pozyskane za pomocą innych, bardziej fundamentalnych metod np. obliczeń *ab-initio*, lub z danych eksperymentalnych.

Wykorzystując metodę MC podjąłem kilka wątków badawczych, których wyniki składają się na przedstawiony cykl publikacji.

Modelowanie MC transportu elektronów w kwantowych laserach kaskadowych

Zaprojektowanie i zbudowanie pierwszego kwantowego lasera kaskadowego [Faist 1994] jest niewątpliwie jednym z największych sukcesów tzw. inżynierii funkcji falowej. W kolejnych latach, ten prawdopodobnie najbardziej skomplikowany przyrząd optoelektroniczny, zrewolucjonizował fotonikę podczerwieni, stając się źródłem światła spójnego wykorzystywanego między innymi w metrologii i spektroskopii molekularnej.

Modelowanie MC transport elektronów w materiałach 2D

Odkrycie w 2004 roku grafenu [Novoselov 2004] było impulsem do badań właściwości zarówno tego materiału [Castro Neto 2009] jak też szeregu innych materiałów 2D, z nadzieją na zastosowania do budowy nowych urządzeń elektronicznych, lub wykorzystania ich w wielu innych dziedzinach.

Krzem pozostaje ciągle głównym materiałem używanym we współczesnej elektronice. Odkrycia dotyczące materiałów 2D stymulują prace zdążające do otrzymania i wykorzystania silicenu, odpowiednika grafenu, zbudowanego z atomów krzemu [Oughaddou 2015, Zhao 2016]. Zademontrowano już [Tao 2015] działający tranzystor zbudowany z tego materiału.

Modelowanie MC z uwzględnieniem efektów spintronicznych

Jedną z koncepcji dalszego rozwoju urządzeń mikroelektronicznych, oraz nadzieją na budowę nowego typu urządzeń jest wykorzystanie spinu jako nośnika informacji. Odkrycie grafenu i innych materiałów 2D daje nadzieję na znaczący postęp w tej dziedzinie [Roche 2015].

Uznałem, że w opisie poniżej bardziej czytelne będzie przedstawienie głównych wyników prac w innej kolejności niż chronologiczna. Zacznę od wprowadzenia do Metod Monte Carlo i mojego wkładu w rozwój algorytmów, które były używane w innych pracach z prezentowanego cyklu. Następnie opiszę wyniki związane z modelowaniem materiałów 2D. Najbardziej złożone symulacje MC dotyczące modelowania QCL zostaną opisane na końcu.

3.2.2 Metody Monte Carlo pozwalające na modelowanie transportu elektronów z uwzględnieniem efektów związanych z zakazem Pauliego

Metody MC używane do badania rozważanych w prezentowanym cyklu zjawisk fizycznych bazują na formalizmie zgodnym z równaniem transportu Boltzmann (BTE), które opisuje funkcję rozkładu elektronów $f(k)$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(k_1)}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f(k_1) - \frac{e}{\hbar} F \cdot \nabla_k f(k_1) = \\ \sum_{\alpha k'_1} \{f(k'_1) s_\alpha(k'_1, k_1) [1 - f(k_1)] - f(k_1) s_\alpha(k_1, k'_1) [1 - f(k'_1)]\} \\ + \sum_{k'_1, k_2, k'_2} \{f(k'_1) f(k'_2) s_{ee}(k'_1, k'_2, k_1, k_2) [1 - f(k_1)] [1 - f(k_2)] \\ - f(k_1) f(k_2) s_{ee}(k_1, k_2, k'_1, k'_2) [1 - f(k'_1)] [1 - f(k'_2)]\}, \end{aligned}$$

gdzie v jest prędkością grupową odpowiadającą wektorowi falowemu k , $s_\alpha(k, k')$ jest częstością przejść ze stanu k do stanu k' w jednostce czasu spowodowaną mechanizmem oddziaływań α , F jest wektorem przyłożonego zewnętrznego pola elektrycznego. Prawa strona równania reprezentuje człon zderzeniowy. Jego pierwszy wiersz opisuje oddziaływania elektronów z niedoskonałościami sieci krystalicznej takimi jak fonony lub domieszki. Czynniki typu $[1 - f(k)]$ odpowiedzialne są za włączenie do modelu zakazu Pauliego. Ostatnie dwa wiersze równania opisują krótkozasięgowe oddziaływania

kulombowskie, dla których $s_{ee}(k_1, k_2, k'_1, k'_2)$ jest częstością przejść między stanami $k_1 \rightarrow k'_1, k_2 \rightarrow k'_2$. Sumowanie w tych czynnikach odbywa się po wszystkich stanach końcowych obu oddziałujących cząstek.

W ogólnym przypadku funkcja rozkładu w sposób jawny zależy od czasu i położenia i powinna być zapisana jako $f(k, r, t)$. W przypadku badań prowadzonych w ramach przedstawionego cyklu zakładany był równomierny rozkład elektronów oraz ich stała liczba, tak więc pierwsze dwa czynniki w powyższym równaniu mogą być pominięte.

Od strony algorytmów obliczeniowych modelowanie polega na śledzeniu zmian w czasie stanów zbioru symulowanych cząstek (elektronów). W kolejnych krokach czasowych Δt symulacji, wektor falowy każdego z rozważanych elektronów zmienia się pod wpływem przyłożonego zewnętrznego pola elektrycznego F zgodnie z klasycznym równaniem $k(t + \Delta t) = k(t) + \frac{e}{\hbar} F \Delta t$. Człon zderzeniowy zawarty w BTE opisywany jest przez część losową metody MC. W każdym kroku symulacji wykorzystywane jest prawdopodobieństwo rozproszenia elektronu ze stanu k do stanu k' , które zależy od elementu macierzowego przejścia między tymi stanami, ale także od czynników odpowiedzialnych za zakaz Pauliego blokujący przejścia do stanów obsadzonych przez inne elektrony.

Powszechnie używana metoda [Lugli 1985], pozwalająca na włączenie czynników $[1 - f(k')]$ w BTE, opiera się na następującej koncepcji. W trakcie symulacji używane są prawdopodobieństwa rozproszeń obliczone przy założeniu, że wszystkie stany końcowe, do których odbywają się rozproszenia, są dostępne. Następnie, gdy wylosowane zostanie zdarzenie rozproszenia, wówczas, na podstawie chwilowego obsadzenia przez inne symulowane elektrony, określana jest wartość funkcji rozkładu stanu końcowego $f(k')$. Aby otrzymać tę wartość, przestrzeń wektora falowego k jest dyskretyzowana na komórki zawierające N_{max} stanów. Wówczas, $f(k') = \frac{N(k')}{N_{max}}$, gdzie $N(k')$ jest liczbą symulowanych elektronów znajdujących się w komórce zawierającej stan końcowy. Następnie, używana jest tzw. metoda odrzucania (rejection method) polegająca na tym, że jeśli wybrana liczba losowa r jest mniejsza niż wartość $f(k')$ to przyjmuje się, że stan jest zajęty przez inny elektron i proces rozproszenia nie jest wykonywany przez algorytmie symulacji.

Niestety, znanym problemem w przypadku użycia tej metody jest to, że może ona prowadzić do uzyskania niefizycznych rozwiązań, z wartościami funkcji rozkładu $f(k) > 1$, szczególnie w zakresie małych energii. Jak wyjaśniliśmy to w jednej z poprzednich publikacji [C3], powstałej w ramach realizacji mojej pracy doktorskiej, wynika to z tego, że jeśli z powodu fluktuacji tymczasowa wartość $N(k') > N_{max}$, to czynnik ten nie jest odpowiednio kompensowany w algorytmie. Redukcja tego typu błędów jest możliwa przez zwiększanie liczby symulowanych elektronów, co w oczywisty sposób znacznie wydłuża czas obliczeniowy.

Dwie prace [A1, A7], które wchodzą w skład prezentowanego cyklu dotyczą rozwoju metod symulacji MC pozwalających na włączenie do modelowania efektów spowodowanych przez zakaz Pauliego, w sposób bardziej efektywny, niż było to możliwe za pomocą uprzednio używanych technik.

Należy tutaj zaznaczyć, że w okresie gdy rozpoczynałem te badania czas obliczeń niezbędny do przeprowadzenia tego typu symulacji MC, wynosił zwykle wiele godzin lub nawet dni. Miało to miejsce szczególnie w przypadku materiałów o dużej gęstości elektronowej. Tak więc poszukiwanie wydajnych metod obliczeniowych miało istotne znaczenie praktyczne. Tematyka ta jest istotna również dzisiaj i wciąż proponowane są ulepszenia i nowe metody obliczeniowe [Romano 2015].

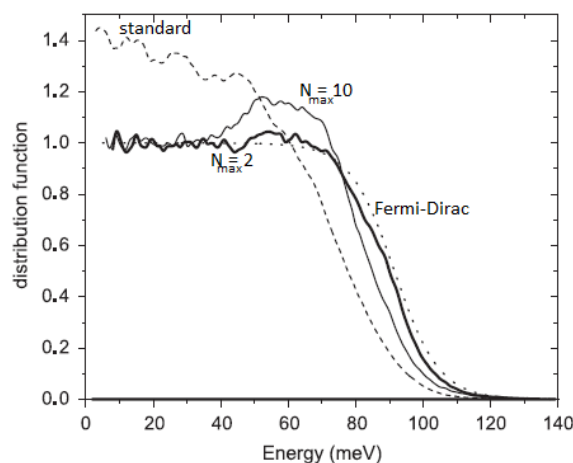
3.2.2.1 Dla oddziaływań elektron-fonon

Jak wykazaliśmy w pracy [A1], formalnie uzasadnione jest dodanie do rozwiązywanego równania Boltzmann'a dodatkowych (uzupełniających) rodzajów rozprożeń, dla których czynnik opisujący prawdopodobieństwo przejścia ze stanu k do stanu k' , z powodu danego mechanizmu rozprożeń α (np. emisja/absorpcja fononów) przybiera postać

$$s_{\alpha}^*(k, k') \frac{f(k') F_1(k)}{f(k)},$$

gdzie $s_{\alpha}^*(k, k') = s_{\alpha}(k', k)$, a $F_1(k)$ odpowiada za przypadki, gdy ze względu na chwilowe fluktuacje $N(k) > N_{max}$ i jest określone w ten sposób, że $F_1(k) = 0$ dla $N(k) \leq N_{max}$ oraz $F_1(k) = \frac{N(k)}{N_{max}} - 1$ dla $N(k) > N_{max}$.

W przypadku tych uzupełniających mechanizmów rozprożeń, podobnie jak w standardowym algorytmie, również jest używana metoda odrzucania ale zamiast czynnika $\left[1 - \frac{N(k')}{N_{max}}\right]$ wykorzystywany jest czynnik $\frac{N(k') F_1(k)}{N(k)}$.



Rysunek 1. Porównanie wyników poprawionej metody z uzyskanymi za pomocą standardowej metody. Dla standardowej metody użyto 10 elektronów na komórkę, dla zaproponowanej metody porównano przypadki z 10 i 2 elektronami na komórkę. Dla porównania przedstawiono analityczną krzywą Fermiego-Diraca. We wszystkich symulacjach łączna liczba użytych elektronów równa się 10 tys. Dla standardowej metody mniejsza liczba elektronów na komórkę dawała znacznie gorsze wyniki niż te zaprezentowane na wykresie. Wyraźne pogorszenie wyników widać dla krzywej $N_{max}=10$ spowodowane jest niedostatecznie gęstą siatką dyskretyzacji przestrzeni wektora falowego. Bardziej gęsta siatka wymagałaby użycia większej łącznej liczby symulowanych elektronów co wiąże się z większym kosztem obliczeniowym.

Jako ilustracja działania ulepszonej metody przeprowadziliśmy obliczenia funkcji rozkładu elektronów w GaAs dla temperatury 77 K i gęstości elektronowej $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, których wyniki są przedstawione na Rysunku 1. Dla rozważanych warunków słabego pola elektrycznego można przyjąć, że jest to stan bliski stanowi równowagi i wyniki modelowania mogą być porównane z krzywą Fermiego-Diraca. Wyniki wskazują na dobrą zgodność przy odpowiednim doborze parametrów modelowania. Wykazana

jest przewaga zaproponowanej metody w stosunku do wyników standardowego algorytmu. Metoda ta była następnie wykorzystywana w późniejszych pracach z przedstawionego cyklu.

3.2.2.2 Dla oddziaływań kulombowskich elektron-elektron

Kolejną [A7] zaproponowaną modyfikacją metod obliczeniowych MC jest rozszerzenie przedstawionego w poprzednim punkcie podejścia na przypadek rozproszonych elektron-elektron (e-e). Wynik ten został uzyskany dużo później niż opisany powyżej przypadek dotyczący rozproszonych elektron-fonon. Ponieważ jednak tematyka jest zbliżona do poprzednio omówionej pracy, uzasadnione jest przedstawienie jej w tym miejscu.

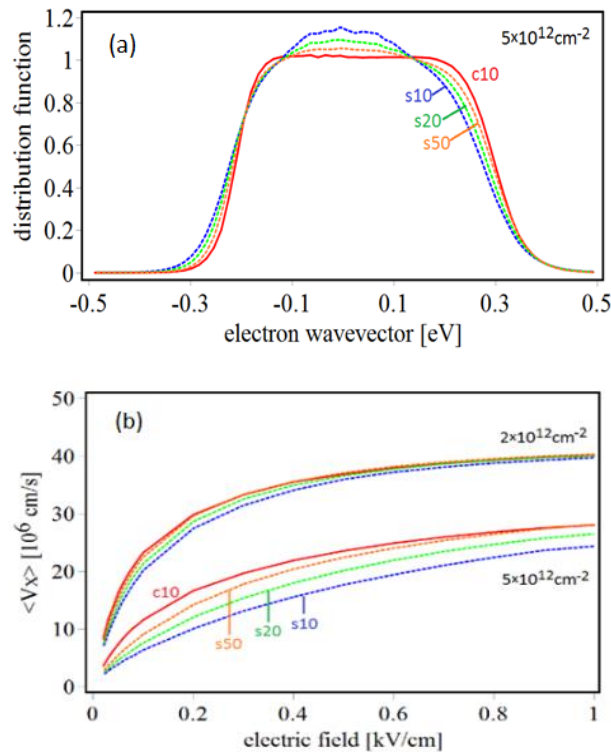
Korzystając z podobnego pomysłu jak przedstawiony w poprzednim punkcie wykazaliśmy [A7], że uzasadnione jest, aby do modelowania dołączony został kolejny, uzupełniający mechanizm rozproszonych, przy czym, zamiast czynnika w formie $[1 - f(k'_1)][1 - f(k'_2)]$, blokującego rozproszenie jeśli przynajmniej jeden ze stanów końcowych jest już obsadzony, dochodzimy do znacznie bardziej złożonej formuły

$$R(k_1, k_2, k'_1, k'_2) = \frac{s_{ee}(k_1, k_2, k'_1, k'_2)}{s_{ee}^{max}} G(k'_1)G(k'_2) + \frac{s_{ee}^*(k_1, k_2, k'_1, k'_2)}{s_{ee}^{max}} \frac{f(k'_1)f(k'_2)}{f(k_1)f(k_2)} (G(k_1)[1 - F(k_2)] + G(k_2)[1 - F(k_1)]) + \frac{s_{ee}^*(k_1, k_2, k'_1, k'_2)}{s_{ee}^{max}} \frac{f(k'_1)f(k'_2)}{f(k_1)f(k_2)} (G(k_1)[1 - F(k_2)] + G(k_2)[1 - F(k_1)]),$$

gdzie czynniki $F(k)$ i $G(k)$ zdefiniowane są w ten sposób, że $f(k) = F(k) + G(k)$. W tym podziale $F(k)$ reprezentuje część nie przekraczającą jedności a $G(k)$ pozostałą fluktuację numeryczną. Oprócz zmiany formuły wyrażenia używanego w metodzie odrzucania wymagane są pewne dodatkowe modyfikacje algorytmu modelowania, którego szczegóły opisane zostały w pracy [A7].

Zmodyfikowana metoda dla rozproszonych e-e została zademonstrowana na przykładzie modelowania transportu elektronów w grafenie. Była następnie wykorzystywana w kolejnych pracach [A5–A10] z prezentowanego cyklu.

Wyniki obliczeń, przedstawione na Rysunku 2(a) demonstrują, że zastosowanie opracowanej modyfikacji metody Lugli-Ferry pozwala na wyraźną redukcję niepoprawnych rozwiązań. Przy obliczaniu funkcji rozkładu udaje się uniknąć przypadków, dla których $f(k) > 1$ w obszarze małych energii. Na Rysunku 2(b) pokazany jest wpływ precyzji w określeniu $f(k)$ na zależności średniej prędkości elektronów od przyłożonego pola elektrycznego.



Rysunek 2. Wyniki symulacji dla zaproponowanej metody (c10) gdy w modelowaniu używane było 10 tys. elektronów oraz dla standardowego, nie poprawionego algorytmu (s10, s20, s50) gdzie używane było odpowiednio 10, 20, 50 tys. elektronów.

3.2.2.3 Znaczenie i możliwości wykorzystania uzyskanych wyników

Przedstawione w prezentowanych pracach ulepszone metody obliczeniowe pozwalają na uniknięcie znanych problemów pojawiających się przy standardowym podejściu używanym do włączenie zakazu Pauliego do modelowania MC. W szczególności, uzyskiwane wartości funkcji rozkładu nie przyjmują niefizycznych wartości $f(k) > 1$.

Prace te dotyczą rozwoju podstawowych algorytmów modelowania Monte Carlo. Zademonstrowane ulepszenia mają ważne zastosowania praktyczne, gdyż mogą być stosowane zarówno do badania materiałów objętościowych 3D, materiałów dwuwymiarowych 2D jak też innych układów, takich jak struktury studni kwantowych lub urządzenia mikroelektroniczne. Śledząc losy opracowanego przeze mnie wcześniej algorytmu, dotyczącego podobnych zagadnień, opisanego w pracy [C3] można zauważyć, że był on wykorzystywany przez innych badaczy, między innymi w modelowaniu własności laserów kaskadowych. Opublikowane później prace [A1, A7] proponują inne, znacznie ulepszone koncepcje rozwiązania podobnych problemów.

Według raportu z bazy Web of Science publikacja [A1] była do tej pory cytowana 3 razy przez innych autorów. Była ona również cytowana w rozprawach doktorskich z uniwersytetów California Santa Cruz, Paris Sud - Paris XI, Wisconsin-Madison, Catania. W przypadku 2 rozpraw doktorskich, autorzy nie cytują później tej pracy w swoich innych publikacjach [Saint-Martin 2005, Willis 2010].

Publikacja [A7] według raportu z bazy Web of Sciences została 1 raz zacytowana przez innych autorów. Została ona również zacytowana w zgłoszonym niedawno preprintcie [Lei 2018].

3.2.3 Zastosowania symulacji Monte Carlo do modelowania własności elektronowych materiałów dwuwymiarowych

Grafen, od czasu wytworzenia po raz pierwszy w 2004 roku, przyciągnął uwagę wielu badaczy zarówno w dziedzinie fizyki, jak też elektroniki i badań materiałowych. Jest to pierwszy zaobserwowany w przyrodzie dwu-wymiarowy kryształ, który oprócz tego posiada niezwykle właściwości elektryczne, chemiczne i mechaniczne. Technologie rozwinięte przy badaniach dotyczących grafenu skutkowały również zainteresowaniem wieloma innymi materiałami 2D. Jednym z przykładów jest silicen, materiał o bardzo podobnej strukturze zbudowany z atomów krzemu.

W powszechnie używanym przybliżeniu oba te materiały nie mają przerwy energetycznej a struktura pasmowa w interesującym dla transportu elektronowego obszarze wektora falowego ma postać tzw. stożków Diraca, z liniową zależnością dyspersji $E(k) = \hbar v_F |k|$, gdzie v_F jest tzw. prędkością Fermiego. Konsekwencją tego jest wiele niecodziennych właściwości elektrycznych takich jak np. zachowanie się elektronów jak quasi-relatywistyczne, pozbawione masy cząstki, które niezależnie od wartości wektora falowego poruszają się ze stałą prędkością grupową v_F .

W związku ze swoimi niezwykle właściwościami elektrycznymi grafen jest często uważany za jeden z najbardziej obiecujących materiałów dla nowych zastosowań w optoelektronice i nanoelektronice. Oprócz tych dziedzin jest on również uważany za obiecującego kandydata do zastosowań w spintronice. Zarówno teoretyczne jak też eksperymentalne wyniki wskazują na długie czasy relaksacji polaryzacji spinowej pozwalające na transmisję stanu spinu w urządzeniach z zachowaniem niezbędnej wiarygodności.

Główną różnicą w modelowaniu MC [Shishir 2009] zastosowanym do badania transportu elektronów w materiałach takich jak jedno-warstwowy grafen lub silicen, w porównaniu z klasycznymi materiałami półprzewodnikowymi takim jak GaAs, jest znacząco inna struktura pasmowa i wynikające z niej inne relacje opisujące prawdopodobieństwa rozproszeń elektronów.

3.2.3.1 Badania własności transportu elektronów w grafenie i silicenie

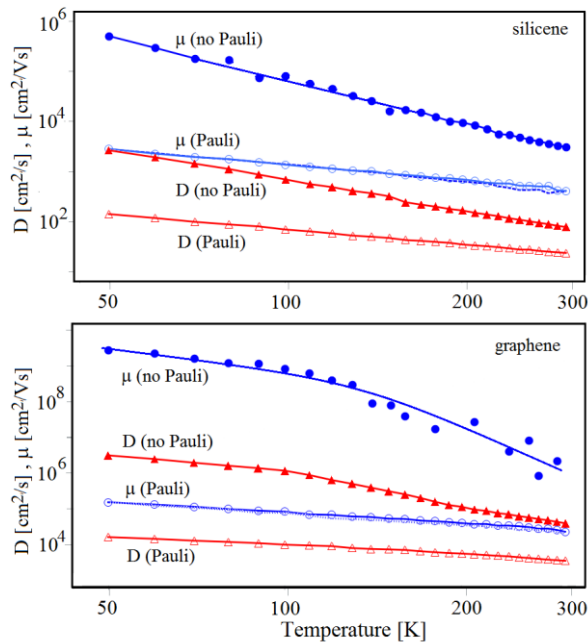
Omówione w tym punkcie wyniki pochodzą z prac [A5, A6]. Praca [A5] została wysłana do wydawnictwa w ramach materiałów po konferencji E-MRS Spring Meeting, Lille 2016, na której była prezentowana w formie plakatu [D11]. Przeszła ona pełny proces *peer review* przez 2 niezależnych recenzentów. Praca [A6] stanowi szersze omówienie tematyki modelowania transportu elektronowego w silicenie.

Modelowanie MC transportu elektronów w grafenie było tematem wielu badań prowadzonych przez innych autorów. W publikacji [A6] zaprezentowaliśmy wyniki podobnych obliczeń dla silicenu. Pierwsze uzyskane wyniki modelowania pozwoliły na ocenę wpływu takich efektów fizycznych jak rozproszenia e-e i degeneracja gazu elektronowego. Jak zademonstrowaliśmy, nawet dla dość niskiej gęstości gazu elektronowego, jakiej używaliśmy w naszych obliczeniach, efekty te w znaczący sposób modyfikują kształt funkcji rozkładu $f(k)$.

Już w obszarze pól elektrycznych rzędu 1 kV/cm, można zaobserwować znaczne rozmycie i przesunięcie funkcji rozkładu w stosunku do równowagowej funkcji Fermiego-Diraca. Jak można było się spodziewać, rozproszenia e-e mają istotny wpływ przy wyższych natężeniach pola elektrycznego.

W omawianej pracy zaproponowaliśmy również prosty model wyjaśniający pojawianie się ujemnej rezystywności różniczkowej (NDR), czyli spadku średniej prędkości unoszenia elektronów wraz ze wzrostem natężenia pola elektrycznego, wynikające wprost z liniowej relacji dyspersji. Przez analogię do materiałów z paraboliczną relacją dyspersji odpowiada to wzrostowi masy efektywnej elektronów wraz ze wzrostem ich energii kinetycznej.

Kolejne obliczenia [A5, A6] pozwoliły na otrzymanie zależności temperaturowych ruchliwości elektronów μ i współczynnika dyfuzji D w zakresie słabych pól elektrycznych. Wyniki te przedstawione zostały na Rysunku 3. W symulacjach użyta została opracowana wcześniej przeze mnie metoda [B2], która pozwala na wyznaczenie D w warunkach zdegenerowanego gazu elektronowego. Na tej podstawie, korzystając z relacji Einsteina, wyznaczone zostały wartości μ .



Rysunek 3. Zależność od temperatury ruchliwości elektronów i współczynnika dyfuzji w silicenie i grafenie w zakresie słabego pola elektrycznego. Wykazanie wpływu uwzględnienia degeneracji gazu elektronowego przy gęstości gazu elektronowego $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ w silicenie i $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ w grafenie.

Wyjaśniliśmy, że uzyskane dla silicenu zależności $\mu \sim T^{-3}$ oraz $D \sim T^{-2}$, dla przypadku niezdegenerowanego gazu elektronowego mają swoje źródło w dwóch czynnikach: pierwszym związanym z rozproszaniem na fononach akustycznych oraz drugim związanym z liniową relacją dyspersji pasma przewodnictwa. Dla gazu zdegenerowanego $\mu, D \sim T^{-1}$, a w tym przypadku wpływ na te zależności ma wyłącznie czynnik związany z rozproszaniem elektronów o stanach bliskich energii Fermiego.

Uzyskane dla grafenu [A5] zależności temperaturowe pokazują, że dla wyższych temperatur, powyżej około 150 K, następuje znacznie szybszy spadek μ i D wraz ze wzrostem temperatury, niż dzieje się to w silicenie. Brak jest również prostej relacji potęgowej. Różnice między tymi dwoma rozważanymi materiałami wynikają z tego, że w silicenie w rozważanym zakresie temperatur dominujące znaczenie ma oddziaływanie elektronów z fononami akustycznymi. Dla grafenu, w wyższych temperaturach,

prawdopodobieństwa oddziaływania elektronu z modami optycznymi i akustycznymi są do siebie zbliżone i oddziaływanie z fononami optycznymi ma wówczas istotne znaczenie.

Porównanie naszych wyników dla silicenu, z dostępnymi w literaturze wynikami modelowania MC z wykorzystaniem w symulacjach pełnej struktury pasmowej (*full band* MC) wskazuje, że dostępne w literaturze parametry materiałowe opisujące procesy rozproszeń nie umożliwiają uzyskania odpowiedniej precyzji wyników. Innym czynnikiem prowadzącym do rozbieżności jest też to, że używany model liniowego przybliżenia relacji dyspersji struktury pasmowej, w przypadku silicenu może być zbytnim uproszczeniem, gdyż jak pokazaliśmy, nawet dla niskich temperatur, znacząca część elektronów posiada energie kinetyczne wykraczające poza zakres uzasadniający to uproszczenie. Mimo tych niedostatków, obliczenia takie mogą dać pewien wgląd w zrozumienie i jakościową interpretację wyników za pomocą prostych modeli.

3.2.3.2 Badanie relaksacji spinowo spolaryzowanego gazu elektronowego w grafenie

Potencjalna możliwość wykorzystania efektów spintronicznych w grafenie jest jednym z czynników motywujących badania w tym kierunku [Roche 2015]. Związane jest to między innymi z długim czasem utrzymywania się polaryzacji spinowej w temperaturze pokojowej. Z drugiej strony gaz elektronowy w grafenie ma charakter zdegenerowany już przy relatywnie niskich koncentracjach nośników. Z tych powodów doszedłem do wniosku, że interesującym tematem badawczym jest przeprowadzenie modelowania MC dotyczącego relaksacji polaryzacji spinowej w zdegenerowanym gazie elektronowym w grafenie.

Włączenie do procedury MC zjawisk związanych ze spinem polega na rozbudowie modelu o śledzenie w czasie zmian orientacji wektora spinu każdego z symulowanych elektronów. W zakresie, który był rozważany w publikacjach wchodzących w skład prezentowanego cyklu, dwa mechanizmy odpowiedzialne są za zmianę kierunku spinu w trakcie ruchu elektronu.

Po pierwsze, zgodnie z wektorowym równaniem ruchu $ds/dt = \Omega \times s$, spin wykonuje precesję wokół wektora Ω prostopadłego do chwilowego kierunku wektora falowego elektronu. Przypadkowe zmiany kierunku ruchu elektronu prowadzą do przypadkowych zmian kierunku Ω i w konsekwencji do relaksacji polaryzacji spinowej układu w tak zwanym rozpraszaniu D'yakonov-Perel'a.

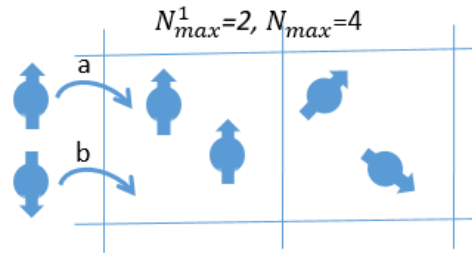
Po drugie uwzględnione zostały rozproszenia Elliot-Yafet'a, które są modelowane wspólnie z oddziaływaniami elektronów z fononami i oddziaływaniami e-e. Prowadzą one, zgodnie z odpowiednim prawdopodobieństwem, do losowego odwrócenia kierunku spinu elektronów w trakcie rozproszenia, co również skutkuje zanikiem polaryzacji spinowej gazu elektronowego.

Przeprowadzone badania [A8] wymagały na wstępie opracowania metody obliczeniowej pozwalającej na uwzględnienie w modelowaniu MC czynników odpowiadających za zakaz Pauliego dla przypadku, gdy mamy do czynienia z częściowo spolaryzowanym spinowo gazem elektronowym.

W standardowej metodzie, która została skrótowo opisana we wcześniejszych punktach, do określenia opisanej przez funkcję rozkładu $f(k')$ zajętości stanów, posługujemy się chwilowym ich obsadzeniem przez zbiór symulowanych elektronów.

Zwróćmy uwagę na zagadnienie rozproszenia dla przypadku, gdy spin elektronu jest uwzględniony *explicite* a nie przyjmując, że ustawienia spinu w układzie są losowe tak jak w standardowej metodzie, lub też określone w wyróżnionym kierunku. Jest to schematycznie przedstawione na Rysunku 4.

W przypadku rozproszenia pokazanego schematycznie jako (a) stany końcowe są całkowicie obsadzone i rozproszenie powinno być zablokowane. W przypadku (b) stany końcowe, biorąc pod uwagę również spin, są całkowicie nieobsadzone i rozproszenie nie jest w żaden sposób blokowane. Należy sobie zadać pytanie o formę czynnika blokującego dla przypadku rozproszeń do komórki przedstawionej po prawej stronie.



Rysunek 4. Schemat działania zakazu Pauliego przy procesach rozproszenia z uwzględnieniem spinu elektronu. Pokazane są komórki dzielące przestrzeń wektora falowego, zawierające po dwa ($N_{max}^1 = 2$) stany dostępne dla danej polaryzacji spinowej, tak więc łącznie $N_{max} = 4$. Strzałki przy schematycznej reprezentacji symulowanych cząstek pokazują orientację spinu danego elektronu.

Jak wykazaliśmy w pracy [A8] wartość funkcji rozkładu, zależnej od kierunku polaryzacji spinowej może być obliczona zgodnie z wyrażeniem

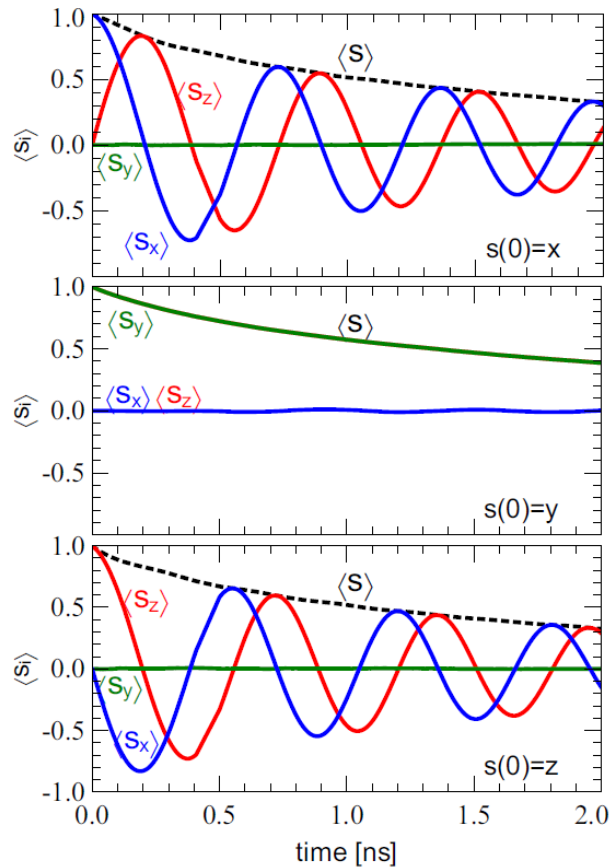
$$f_{s_0}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N_{max}^1} \sum_i \frac{1}{2} (1 + \mathbf{s}_0 \cdot \mathbf{s}_i),$$

gdzie \mathbf{s}_0 jest wektorem spinu elektronu rozpraszanego, sumowanie odbywa się po wszystkich elektronach w komórce, a N_{max}^1 jest liczbą dostępnych stanów bez uwzględnienia degeneracji spinowej ($N_{max} = 2 N_{max}^1$). Wyrażenie to może być użyte w algorytmach MC opisanych w poprzednich punktach.

Zaproponowaną metodę zastosowaliśmy do modelowania relaksacji spinowo spolaryzowanych elektronów w grafenie. Użyty model *eksperymentu numerycznego* można opisać następująco: na początku symulacji gaz elektronowy spolaryzowany jest w kierunku wybranej osi: oś X leży w płaszczyźnie warstwy grafenu i jest równoległa do przyłożonego pola elektrycznego, oś Y też leży w tej płaszczyźnie i jest prostopadła do pola, oś Z jest prostopadła do płaszczyzny materiału. Na początku symulacji funkcja rozkładu elektronów ma charakter funkcji Fermiego-Diraca, obsadzone są tylko stany o wybranym kierunku i zwrocie spinu, stany o zwrocie przeciwnym są całkowicie puste. Następnie w trakcie symulacji MC ewolucji podlegają zarówno wektor falowy jak też spin rozważanych elektronów.

Pierwszym uzyskanym wynikiem są zależności ewolucji w czasie składowych średniego wektora spinu elektronów wzdłuż osi układu współrzędnych, co przedstawione zostało na Rysunku 5. W przypadku gdy początkowa polaryzacja spinu jest w kierunku osi X lub Y obserwowane są oscylacje w czasie pomiędzy składowymi $\langle s_x \rangle$, $\langle s_z \rangle$. W przypadku początkowej polaryzacji spinu w kierunku osi Y obserwowany jest jedynie zanik polaryzacji bez charakteru oscylacyjnego.

Jak wyjaśniliśmy, zachowanie to jest wynikiem asymetrii funkcji rozkładu elektronów związanej z jej przesunięciem w kierunku przeciwnym do przyłożonego pola elektrycznego. Prowadzi to do różnej od zera tylko jednej składowej wektora precesji spinu $\langle \Omega_y \rangle$. Opis ten pozwolił również na interpretację uzyskanych przez nas zależności częstości oscylacji od temperatury i natężenia przyłożonego pola elektrycznego.

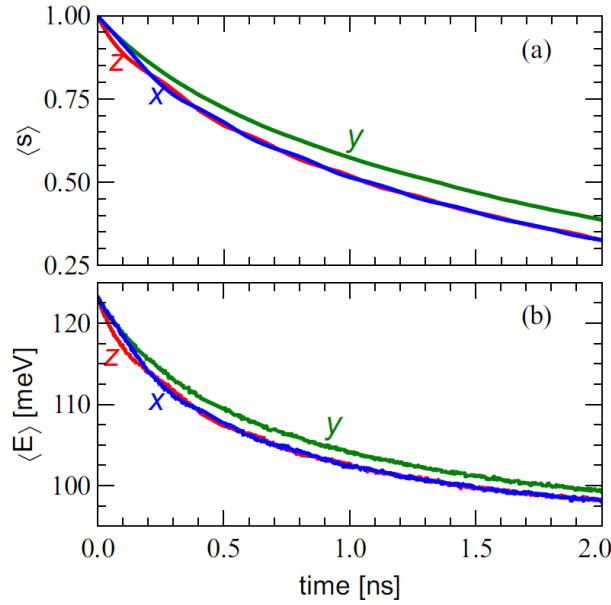


Rysunek 5. Ewolucja w czasie składowych polaryzacji spinowej elektronów $\langle s_x \rangle$, $\langle s_y \rangle$, $\langle s_z \rangle$ określonych w kierunku osi wybranego układu współrzędnych. Etykiety na rysunkach określają kierunek polaryzacji spinowej zespołu elektronów na początku symulacji. Łączny stopień polaryzacji spinowej $\langle S \rangle$ pokazany jest linią przerywaną.

Innym uzyskanym wynikiem jest zależność zaniku w czasie stopnia polaryzacji spinowej zespołu elektronów $\langle S \rangle$. Parametr ten jest zdefiniowany jako $\langle S \rangle = \sqrt{\langle s_x \rangle^2 + \langle s_y \rangle^2 + \langle s_z \rangle^2}$. Zależności takie, dla różnych rozważanych kierunków początkowej polaryzacji spinu zostały pokazane na Rysunku 6(a). Jak można zauważyć, zanik polaryzacji jest najbardziej powolny w przypadku, gdy jest to kierunek osi Y, leżący w płaszczyźnie materiału, prostopadły do przyłożonego pola elektrycznego. Dla początkowej polaryzacji w innych kierunkach, również dla wartości $\langle S \rangle$ można zaobserwować oscylacyjny charakter, co wyjaśniliśmy w publikacji [A8].

Z zanikiem stopnia polaryzacji spinowej ściśle związana jest relaksacja średniej energii kinetycznej elektronów, co zostało pokazane na Rysunku 6(b). Elektrony, które na skutek procesów rozproszeń zmieniają swój kierunek spinu na różny od spinu pozostałego zbioru cząstek, od tego momentu mogą rozpraszać się do nieobsadzonych stanów o niższych energiach, co wiedzie do spadku średniej energii kinetycznej nośników.

Otrzymane w wyniku obliczeń czasu relaksacji polaryzacji spinowej (około 1,5 ns) mieszczą się w zakresie publikowanych wyników doświadczalnych i teoretycznych.



Rysunek 6. Zanik w czasie stopnia polaryzacji spinowej elektronów (a) oraz relaksacja średniej energii kinetycznej elektronów (b). Etykiety X, Y i Z przy krzywych oznaczają początkowy kierunek polaryzacji spinowej.

3.2.3.3 Badania relaksacji wzbudzonych elektronów w spinowo spolaryzowanym gazie elektronowym w grafenie.

W kolejnej pracy [A9] rozważaliśmy za pomocą metody MC zagadnienie związane z rozproszaniem e-e w grafenie. Z powodu nierozróżnialności cząstek, w przypadku oddziaływania dwóch elektronów o takim samym spinie, należy uwzględnić tzw. efekt wymiany. Element macierzowy, jaki jest wykorzystywany w obliczeniu prawdopodobieństwa rozproszenia e-e zależy więc od wzajemnej polaryzacji spinowej oddziałujących elektronów:

$$|M_{\uparrow\uparrow}|^2 = |V(q) - V(q')|^2,$$

oraz

$$|M_{\uparrow\downarrow}|^2 = |V(q)|^2 + |V(q')|^2,$$

gdzie $V(q) \equiv \langle k_1, k_2 | W | k'_1, k'_2 \rangle$, $q = |k_1 - k'_1|$, $q' = |k_1 - k'_2|$.

Jak pokazaliśmy [A9] korzystanie z tych wyrażeń w przypadku materiałów typu grafen wymaga zwrócenia szczególnej uwagi na używaną definicję wektora falowego k elektronów. Dogodną, powszechnie używaną praktyką jest przyjęcie początku układu współrzędnych w stożku Diraca, tak aby można było opisać relację dyspersji za pomocą analitycznej liniowej formuły $E(k) = v_F \hbar |k|$. Zwróciliśmy uwagę na to, że w grafenie elektrony obsadzają dwie doliny w paśmie przewodnictwa, położone w punktach K i K' strefy Brillouina. **W takim przypadku doszliśmy do zmodyfikowanej wersji tych wyrażeń dla materiałów z dwiema dolinami**

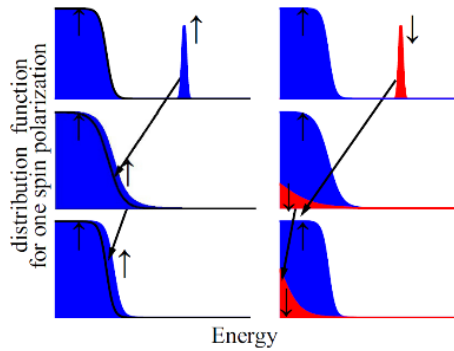
$$|M_{\uparrow\uparrow,2v}|^2 = \frac{1}{2} \{ |V(q) - V(q')|^2 + |V(q)|^2 + |V(q')|^2 \},$$

$$|M_{\uparrow\downarrow,2v}|^2 = |V(q)|^2 + |V(q')|^2.$$

Otrzymaliśmy również postać efektywnego elementu macierzowego, który powinien być używany dla przypadku gazu elektronowego o losowej orientacji spinów

$$|M_{rnd,2v}|^2 = \frac{1}{2} \left\{ |V(q)|^2 + |V(q')|^2 - \frac{1}{2} V(q)V(q') \right\}.$$

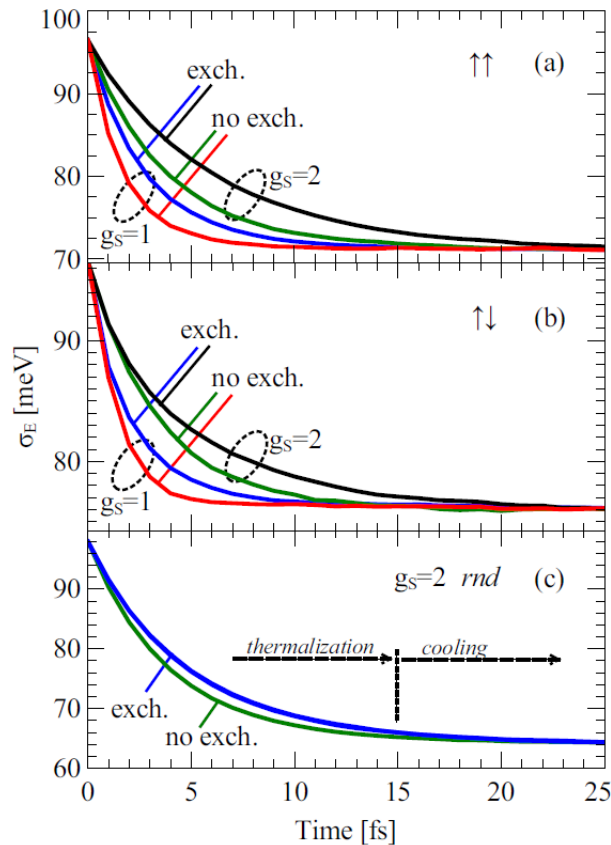
Jako ilustrację otrzymanych formuł rozważyliśmy zagadnienie, dla którego rozproszenia e-e mają decydujące znaczenie. Jest to proces ultraszybkiej relaksacji wzbudzonych elektronów, co schematycznie przedstawione jest na Rysunku 7. Rozważamy tutaj układ składający się z tła spinowo spolaryzowanych elektronów, znajdujących się w stanie równowagi, do którego jest wstrzyknięta mała dodatkowa populacja nośników o ustalonej energii. Można dla niej dobrać kierunek polaryzacji spinowej zgodnie z założeniami *eksperymentu numerycznego*.



Rysunek 7. Schematyczny przebieg procesu relaksacji paczki elektronów wstrzykniętych do układu zawierającego tło w postaci zdegenerowanego gazu elektronowego z polaryzacją spinową. Lewa kolumna odpowiada przypadkowi gdy polaryzacja spinowa wstrzykniętych elektronów jest zgodna z polaryzacją elektronów tła, prawa kolumna przypadkowi gdy polaryzacje są antyrównoległe. Orientacja spinu elektronów zaznaczona jest kolorem i strzałkami. Przejście od górnego do środkowego wiersza rysunku pokazuje *termalizację* a przejście od środkowego do dolnego – *oziębienie* (cooling) populacji w czasie kolejnej fazy relaksacji.

Powszechnie przyjęte jest rozróżnienie dwóch faz relaksacji. Pierwsza ultraszybka faza – *termalizacja*, prowadzi do niestacjonarnego rozkładu, który jest zbliżony do rozkładu Fermiego-Diraca ale o wyższej temperaturze efektywnej. Zgodnie z wieloma pracami teoretycznymi i eksperymentalnymi dotyczącymi relaksacji wzbudzonych optycznie elektronów, *termalizacja* zachodzi w skali czasowej od kilkunastu do kilkudziesięciu femtosekund i w głównej mierze jest ona wynikiem rozprożeń e-e. Druga faza relaksacji – *oziębienie*, prowadzi do ustalenia stanu równowagi termicznej między gazem elektronowym i materiałem, a zachodzi ona w skali rzędu kilkunastu pikosekund poprzez oddziaływania z fononami.

Ponieważ proces termalizacji elektronów odbywa się głównie poprzez rozproszenia e-e, które zgodnie z prawami zachowania nie zmieniają całkowitej energii układu, a jedynie jej rozłożenie między cząstkami, rozróżnienie między różnymi fazami relaksacji nie jest możliwe na podstawie analizy średniej energii elektronów. Zaproponowaliśmy więc użycie odchylenia standardowego energii σ_E jako miary, której ewolucja w czasie pozwala na rozróżnienie tych faz.



Rysunek 8. Odchylenie standardowe energii elektronów σ_E w funkcji czasu od początku relaksacji. Porównanie dwóch modeli rozprożeń e-e: z/bez efektu wymiany, oraz modeli ekranowania rozprożeń z poziomem degeneracji spinowej $g_s = 1$, $g_s = 2$. Wzajemna polaryzacja spinowa elektronów tła i wstrzykniętych nośników jest zaznaczona na Rysunkach: (a) równoległa, (b) anty-równoległa, (c) brak polaryzacji spinowej. Na Rysunku (c) zaznaczone jest schematycznie rozróżnienie między fazami termalizacja i oziębienie.

Rysunek 8 prezentuje wyniki pochodzące z pracy [A9], które chciałbym przytoczyć w tym omówieniu. Po pierwsze porównaliśmy wyniki symulacji dla przypadku, gdy efekt wymiany jest włączony do obliczeń z przypadkiem gdy efekt ten jest zaniewany (wszystkie rozproszenia e-e traktowane są jak dla przypadku elektronów o spinach anty-równoległych). Po drugie porównaliśmy jaki wpływ ma odpowiednie uwzględnienie polaryzacji gazu elektronowego w obliczeniach funkcji dielektrycznej, opisującej ekranowanie rozprożeń e-e.

Tak jak można było się tego spodziewać, uwzględnienie efektu wymiany prowadzi do nieco bardziej powolnej termalizacji, co wynika z tego, że zmniejsza on częstość rozprożeń e-e w przypadku oddziaływania między elektronami o takim samym kierunku spinu. Co ciekawe, wpływ efektu wymiany widoczny również dla przypadku gdy do układu wstrzykiwane są elektrony o spinie anty-równoległym do spinu elektronów tła. Związane jest to z tym, że już po kilku femtosekundach część energii kinetycznej wstrzykniętych elektronów przepływa do elektronów tła. Od tego momentu rozpoczyna się proces termalizacji rozkładu elektronów tła, również za pośrednictwem rozprożeń e-e, ale tym razem rozproszenia te odbywają się pomiędzy elektronami ze spinami równoległymi. Kolejną obserwacją wynikającą z naszych obliczeń, pokazaną na Rysunku 8(c), jest to, że efekt wymiany ma też widoczny wpływ na proces termalizacji nie spolaryzowanego gazu elektronowego.

W omawianej pracy porównaliśmy również termalizację elektronów dla przypadków gdy kierunek i zwrot polaryzacji spinowej wstrzykniętych nośników jest zgodny z polaryzacją spinową tła i po drugie

dla przypadku tak zwanej anty-równoległej wzajemnej polaryzacji. Dla pierwszego przypadku termalizacja następuje nieco wolniej. Pokazaliśmy również, że termalizacja elektronów jedyne w niewielkim stopniu zależy od energii wstrzykniętych nośników.

Kontynuacją tych badań jest praca [A10] gdzie w symulacjach rozważana była termalizacja wzbudzonych elektrów i dziur w obecności tła spinowo spolaryzowanego gazu elektronowego. W początkowej fazie procesu relaksacji zachowanie nośników determinowane jest głównie przez rozproszenia kulombowskie zachodzące między wszystkimi nośnikami – elektronami i dziurami. Proces ten prowadzi do redystrybucji energii kinetycznej wzbudzonych elektronów i dziur w całym układzie, w szczególności z elektronami tła. W tym przypadku możliwe jest rozróżnienie faz termalizacji i oziębienia na podstawie analizy zależności czasowych średniej energii elektronów lub dziur a także na podstawie takich zależności dla odchylenia standardowego energii. Wyniki wskazują na znikomą zależność czasów charakteryzujących termalizację od kierunków polaryzacji spinowej elektronów tła oraz wzbudzonych, co można wyjaśnić jako redukcję wpływu efektu wymiany na rozproszenia kulombowskie, spowodowaną wielodolinowym charakterem struktury pasmowej [A9]. **Uzyskane czasy termalizacji nośników rzędu kilku femtosekund są zgodne z dostępnymi danymi eksperymentalnymi i teoretycznymi dla przypadków nie spolaryzowanego spinowo gazu elektronowego.**

3.2.3.4 Znaczenie i możliwości wykorzystania wyników dotyczących modelowania materiałów dwuwymiarowych

Modelowanie transportu elektronowego w silicenie należy traktować jako wstęp do dalszych badań oraz w szczególności sprawdzenie podejścia bazującego na analitycznym przybliżeniu struktury pasmowej. Jak do tej pory mało jest wyników eksperymentalnych pozwalających na ocenę wyników obliczeń a także na wnioski na temat potencjalnego wykorzystania tego materiału.

Praktyczne znaczenie badań nad transportem elektronowym w grafenie, może być widoczne w dalszej perspektywie czasowej. Warto nadmienić, że jeden z największych projektów naukowo-technologicznych finansowanych przez Unię Europejską dotyczy rozwoju tej tematyki. Budżet projektu Graphene Flagship wynosi około 1 mld Euro, a jego ważną częścią jest tematyka badań spintronicznych [Roche 2015].

Zaproponowana metoda MC pozwalająca na włączenie do modelowania zakazu Pauliego w przypadku dowolnej polaryzacji spinowej nie jest jednak ograniczona wyłącznie do badań grafenu. Wiele innych prac teoretycznych i eksperymentalnych poświęconych jest badaniu relaksacji spinowej w warunkach degeneracji, w różnych materiałach i w tych przypadkach zademonstrowana metoda może być użyteczna przy wyjaśnianiu i interpretacji wyników badań doświadczalnych. **Tym niemniej, szczególnie istotnym wynikiem pracy [A8] jest pokazanie możliwości rozszerzenia zastosowań metody obliczeniowej, co jest interesujące głównie dla badaczy zajmujących się fizyką obliczeniową i jej zastosowaniami w elektronice, rozwijających oprogramowanie MC.**

Uzyskane w pracy [A9] wyrażenia opisujące rozproszenia elektron-elektron w materiałach, w których transport elektronowy odbywa się w dwóch dolinach w strefie Brillouina, mają znaczenie nie tylko w przypadku grafenu. Szczególną uwagę należy zwrócić na rozwijające się ostatnio badania nad tak zwaną elektroniką dolinową (valeytronics), w której wykorzystywany jest dodatkowy stopień swobody związany z obecnością nośników w różnych dolinach struktury pasmowej.

W ramach tych prac została również opracowana metoda pozwalająca na modelowanie rozproszeń e-e w grafenie i innych materiałach z liniową relacją dyspersji. Wcześniejsze prace innych autorów [Li 2010] co prawda włączają rozproszenia e-e do modelowania grafenu, ale niestety nie podają żadnych szczegółów dotyczących swojego podejścia, pozwalających na odtworzenie go w innych pracach. **Tego typu trudność była wskazana przez recenzentów jednej z naszych prac, co było dodatkową zachętą do publikacji szczegółowego opisu opracowanej przez nas metody, który zawarliśmy w pracy [A7].** Opisu tego nie powtarzam w prezentowanym tutaj omówieniu.

Modelowanie zjawisk fizycznych związanych z rozproszaniem e-e, w tym zjawisk zachodzących w bardzo krótkiej skali czasowej w grafenie, co było przedmiotem prac [A7, A9, A10] oprócz znaczenia poznawczego ma też znaczenie praktyczne, gdyż może być wykorzystane w badaniach związanych z budową ultra-szybkich urządzeń fotonicznych i optoelektronicznych, w których jest wykorzystywany ten materiał.

Według raportu z bazy Web of Science publikacja [A5] była cytowana w 2 pracach a publikacja [A6] w 7 pracach innych autorów, praca [A7] została zacytowana 1 raz przez innych autorów. Została ona również zacytowana w zgłoszonym niedawno preprintcie [Lei 2018].

Prace [A8-A10] zostały opublikowane niedawno i raport z bazy Web of Science nie odnotowuje jeszcze cytowań przez innych autorów.

3.2.4 Modelowanie Monte Carlo kwantowych laserów kaskadowych

W poprzednich punktach skupiłem się na opisie wyników badań przeprowadzonych dla przypadku transportu lub relaksacji elektronów w materiałach. Dużo bardziej rozbudowane modele symulacji MC są wymagane w przypadku, gdy interesują nas zjawiska zachodzące w strukturach półprzewodnikowych. Przykładem, którym zajmowałem się w mojej działalności badawczej, są kwantowe lasery kaskadowe - QCL.

W przeciwieństwie do klasycznych laserów półprzewodnikowych, w których emisja światła następuje w wyniku przejścia elektronu z pasma przewodnictwa do pasma walencyjnego, QCL emitują promieniowanie dzięki przejściom wewnątrz pasmowym, pomiędzy podpasмами wytworzonymi w układzie studni i barier kwantowych. Pozwala to na dużo większą elastyczność pod względem możliwych do osiągnięcia długości fali emitowanego promieniowania, co może być określone przez odpowiedni projekt struktury a nie determinowane przez szerokość przerwy energetycznej materiału. Cała struktura jest długim ciągiem ułożonych na przemian barier i studni kwantowych, w którym można wyróżnić powtarzalny element potocznie zwany segmentem. Elektron przechodząc przez taką strukturę, w sposób kaskadowy od segmentu do segmentu, w idealnym przypadku w każdym segmencie może emitować foton.

Na początek warto wspomnieć o różnych metodach teoretycznych używanych do badania własności QCL, co może pomóc uzasadnić przydatność wybranego podejścia z użyciem metody MC. Metoda bilansu (Rate Equation) [Donovan 2001] bazuje na podobnym semiklasycznym modelu transportu (transport zdominowany przez rozproszenia) opisanym przez BTE. Jest to więc faktycznie ten sam model fizyczny jak w przypadku metody MC. Jej zaletą jest łatwiejszy w implementacji algorytm oraz mniejsze wymagania związane z czasem obliczeń. Ceną za to są dodatkowe założenia dotyczące np. kształtu funkcji rozkładu elektronów, zwykle przybliżanej przez rozkład Fermiego-Diraca, lub też przyjęcie

jeszcze prostszego modelu wykorzystującego fenomenologiczne wartości czasów rozprożeń między podpasdami w strukturze QCL.

Innym podejściem jest wykorzystanie metody bazującej na formalizmie macierzy gęstości [Iotti 2001], którego główną zaletą w porównaniu z symulacjami MC jest możliwość uwzględnienia w modelu tunelowania poprzez bariery potencjału, wraz z procesem utraty fazy funkcji falowej. Tym niemniej model ten wciąż bazuje na wielu założeniach takich jak np. mechanizmy rozprożeń opisane za pomocą złotej reguły Fermiego a także założenie dotyczące termalizowanego rozkładu na podpasmach. W przypadku rozważanych przeze mnie struktur laserów pracujących w obszarze średniej podczerwieni porównanie tych obu modeli [Iotti 2001] wskazuje, że podejście reprezentowane przez model MC jest uzasadnione.

Pełny kwantowy opis transportu elektronowego w QCL możliwy jest z wykorzystaniem metody nierównowagowych funkcji Greena (NEGF) [Wacker 2002]. Niestety podejście to jest bardzo wymagające obliczeniowo a także interpretacja wyników wymaga dodatkowego wysiłku.

Wybór metody MC jest rozsądnym kompromisem pozwalającym na uniknięcie wielu dodatkowych założeń lub konieczności używania parametrów fenomenologicznych. Daje przy okazji możliwość łatwego dostosowania do badania różnych struktur. Uzyskiwane za pomocą modelowania MC wyniki potwierdzone są przez dane doświadczalne.

Sądzę, że pewnego komentarza wymaga w tym miejscu wybór przedmiotu badań to znaczy QCL pracujących o obszarze średniej podczerwieni i w szczególności konkretnej struktury. Wynikał on z udziału w grantie badawczym wymienionym w punkcie 4.5, którego jednym z celów było opanowanie w Polsce technologii wytwarzania kwantowych laserów kaskadowych. **Badana struktura, zaprojektowana kilka lat wcześniej przez H. Page i współpracowników [Page 2001], była wybrana jako podstawa do tych prac. Laser bazujący na niej został wykonany [Kosiel 2009] w Instytucie Technologii Elektronowej w Warszawie. Dalszy rozwój w dziedzinie budowy i wykorzystania QCL w Polsce [Bugajski 2014] również bazuje na tej konstrukcji.**

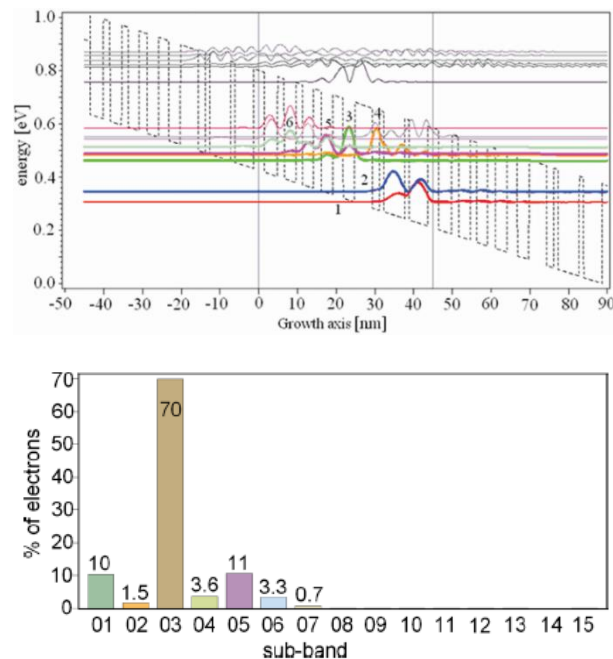
3.2.4.1 Wybrane wyniki modelowania

W artykule monograficznym [A4] przedstawiliśmy przegląd aktualnego stanu wykorzystania metody MC do badania właściwości i projektowania struktur QCL. Poniżej zostaną zreferowane wyniki przedstawione w pracach [A2, A3], w których przedmiotem badań była struktura QCL po raz pierwszy zademonstrowana przez H. Page i współpracowników [Page 2001].

Pierwszymi wynikami obliczeń, będącymi równocześnie jednymi z głównych parametrów wejściowych do właściwej symulacji MC, są położenia poziomów energetycznych oraz kształty funkcji falowych w strukturze lasera, co pokazane jest na Rysunku 9. Uzyskiwane są one poprzez numeryczne rozwiązanie sprzężonych równań Schrödingera i Poissona.

Powszechnie używany model MC zakłada, że transport nośników odbywa się w kierunku wzrostu heterostruktury poprzez *przeskoki* pomiędzy dyskretnymi poziomami energetycznymi. Symulowany elektron oprócz przypisania do poziomu charakteryzowany jest przez 2-wymiarowy wektor falowy w płaszczyźnie warstw struktury. Prawdopodobieństwa przejść między stanami liczone są z uwzględnieniem kształtu funkcji falowych i położenia poziomów energetycznych. Wykonywane jest to na początku symulacji lub w jej trakcie, jeśli są to obliczenia samouzgodnione.

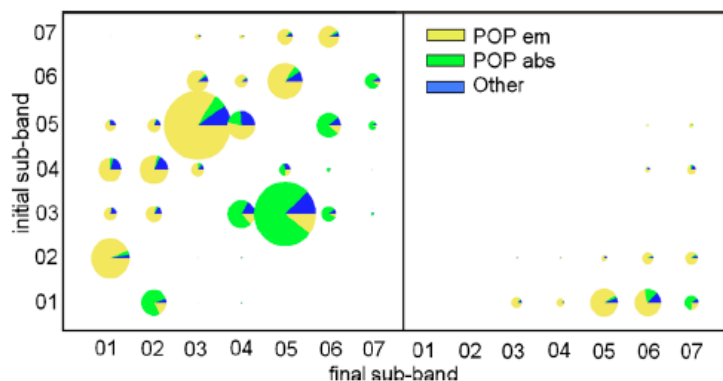
Podstawowym wynikiem uzyskanym już przez właściwą symulację MC są przedstawione na Rysunku 9 populacje elektronów na poszczególnych poziomach energetycznych [A2]. **Dla tej struktury akcja laserowa zachodzi między poziomami 4 i 2, można więc zauważyć, że modelowanie MC prawidłowo przewiduje wystąpienie inwersji obsadzeń.**



Rysunek 9. Góra: Rozwiązania równania Schrödingera jako kwadraty modułów funkcji falowych, schematycznie przesunięte do poziomu energii własnej, na tle struktury potencjału dla 3 segmentów QCL. Dół: Uzyskane za pomocą symulacji MC populacje elektronów jako procent całkowitej gęstości nośników w jednym segmencie lasera QCL.

Kolejnym wynikiem uzyskanym poprzez symulacje MC są kształty funkcji rozkładu elektronów $f_i(E)$ dla każdego z podpasm. Jak pokazaliśmy w pracy [A2], dla rozważanej struktury, są one zbliżone do funkcji rozkładu Boltzmana, co powoduje, że można przyjąć za uzasadnione opisanie rozkładu elektronów z użyciem temperatury efektywnej elektronów na danym poziomie energetycznym. Dla założonej w obliczeniach temperatury materiału urządzenia 150 K, temperatury efektywne na najbardziej obsadzonych poziomach plasują się w przedziale 160–210 K. Ta stosunkowo mała rozpiętość tej wartości, została wyjaśniona przez wpływ rozproszeń e-e dość szybko wyrównujących energię kinetyczną nośników między różny podpasmami.

Metoda MC posłużyła nam również do uzyskania mikroskopowego obrazu transportu elektronów w badanej strukturze QCL. Na Rysunku 10 pokazany jest jeden z wyników pozwalający na prześledzenie „drogi” prądu płynącego w strukturze. Można z niego wywnioskować np., że do górnego poziomu laserującego (4) elektrony trafiają głównie z poziomów 3 i 5. Ucieczka elektronów z górnego stanu laserującego następuje do poziomów 2 i 1. Prąd płynący przez strukturę jest głównie wynikiem przejść z poziomu 2 do poziomów 5 i 6 znajdujących się w sąsiednim segmencie.

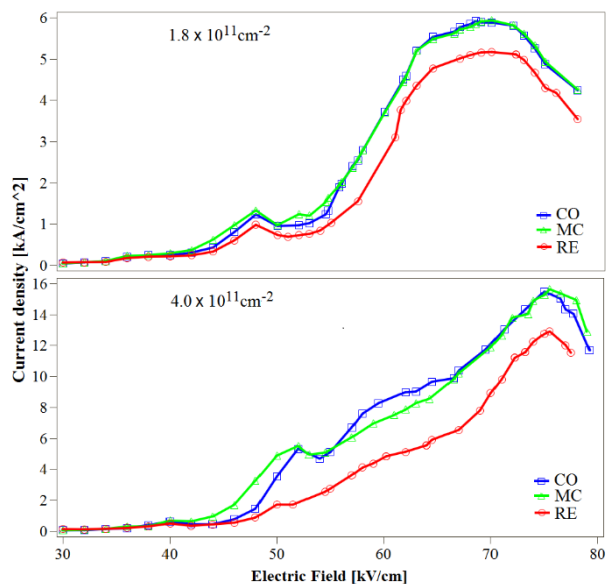


Rysunek 10. Diagram obrazujący intensywność przejść między różnymi stanami w strukturze QCL. Udział danego typu rozproszenia pokazany jest kolorem: POP – fonony optyczne polarne, em – emisja, ab – absorpcja. Rozmiar bąbelka odpowiada liczbie rozproszeń w jednostce czasu. Lewa część rysunku odpowiada przejściom między stanami przypisanymi do jednego segmentu lasera. Prawa część obrazka odpowiada przejściom do sąsiedniego segmentu.

Ważnym wnioskiem z przeprowadzonych obliczeń jest określenie znaczenia rozproszeń e-e na funkcjonowanie urządzenia. Pomimo tego, że rozproszenia te nie są bezpośrednią przyczyną przejść między poziomami energetycznymi, prowadzą one do redystrybucji energii kinetycznej między elektronami w całym układzie oraz do boltzmannowskich funkcji rozkładu na różnych poziomach. Warunki te prowadzą do możliwości powstania inwersji obsadzeń w tym typie struktury. W modelowaniu pomijającym rozproszenia e-e [B3] nie udało się uzyskać potwierdzenia powstawania inwersji obsadzeń pomiędzy poziomami laserującymi.

Na dalszym etapie prac [A3, B7] zajęliśmy się badaniem efektów związanych ze zmianą kształtu potencjału elektrycznego w strukturze, w zależności od poziomu domieszki obszaru iniektora. Zmiany te spowodowane są nierównomiernym rozłożeniem ładunku wzdłuż struktury, co jest wynikiem separacji położenia elektronów i domieszki. W dalszej konsekwencji, modyfikuje to stany elektronowe dane przez rozwiązania równania Schrödingera, a następnie wiedzie do modyfikacji innych parametrów wchodzących do symulacji. Uwzględnienie tych efektów wymaga wykonania obliczeń samouzgodnionych pomiędzy modelowaniem MC, rozwiązywaniem sprzężonych równań Schrödingera i Poissona oraz obliczaniem prawdopodobieństw rozproszeń. Powoduje to znaczne zwiększenie komplikacji i czasu obliczeń.

Korzystając z obserwacji poczynionych w poprzednio omówionej publikacji [A2], dotyczących kształtu funkcji rozkładu elektronów oraz temperatur efektywnych na różnych poziomach, zaproponowaliśmy [A3] podejście hybrydowe łączące metodę MC z prostszą obliczeniowo, gdyż przyjmującą pewne upraszczające założenia, metodą bilansu. **Metoda ta pozwoliła nam na skrócenie wymaganego czasu obliczeń od dwóch do kilkunastu razy w zależności od rozważanego przypadku. Biorąc pod uwagę to, że każdy punkt na charakterystyce prądowo-napięciowej to osobna symulacja, oraz to, że w wielu przypadkach wykonywane jest wiele symulacji dla różnych warunków (temperatura, poziom domieszki) lub różnych struktur, przyspieszenie obliczeń ma praktyczne znaczenie.**



Rysunek 11. Gęstość prądu płynącego w strukturze QCL, porównanie wyników uzyskanych metodą bilansu (Rate Equation – RE), samouzgodnioną metodą MC, hybrydową metodą RE+MC (CO). Porównanie dla dwóch poziomów domieszkowania struktury.

Rysunek 11 wskazuje na bardzo dobrą zgodność wyników uzyskanych metodą hybrydową w porównaniu z uzyskanymi za pomocą samouzgodnionej metody MC, która w tym przypadku może być uznawana za referencyjną. Podobnie dobrą zgodność uzyskaliśmy dla populacji elektronów na różnych poziomach energetycznych, w tym najbardziej interesujących poziomach, pomiędzy którymi występuje akcja laserowa.

W pracach [A2, A3] porównaliśmy wyniki naszych symulacji MC z dostępnymi w literaturze danymi eksperymentalnymi i teoretycznymi. Jednym z wyników omawianych w pracy [A2] jest inwersja obsadzeni $N_{\text{up}}/N_{\text{down}}$, która w naszych obliczeniach jest rzędu 2.4, gdy pomiary dla takiej struktury dają wyniki rzędu 10. Przyczym należy zwrócić uwagę na to, że pomiary eksperymentalne były wykonywane przy wyższym natężeniu przyłożonego pola elektrycznego, niż używane w naszych obliczeniach. W pracy [A3], na rysunku 3 pokazaliśmy, że przy wyższych polach uzyskiwana może być wyższa wartość inwersji obsadzeń. Uzyskana w naszych obliczeniach wartość efektywności wstrzykiwania elektronów na górny poziom laserujący rzędu 61% może być porównana z wynikami innych autorów podającymi tą wartość w przedziale 60-95%. **Uzyskana zgodność, a także możliwość wyjaśnienia pojawiających się rozbieżności, uzasadnia przydatność przyjętego modelu.**

3.2.4.2 Znaczenie i możliwości wykorzystania wyników dotyczących modelowania kwantowych laserów kaskadowych

Wśród wątków badawczych jakie podjąłem, modelowanie transportu elektronowego w laserach kaskadowych jest najbliższe praktycznym zastosowaniom w pracach badawczych nad udoskonalaniem urządzeń mikroelektronicznych, które mogą być już obecnie wytwarzane w skali komercyjnej. Prace rozwojowe związane z optymalizacją parametrów struktur QCL wymagają

wsparcia teoretycznego przez modelowanie komputerowe pomagające w dogłębnym zrozumieniu zjawisk fizycznych rządzących transportem elektronów.

Według raportu z bazy Web of Science publikacja [A2] była cytowana w 5 pracach innych autorów. Oprócz wymienionych w tym raporcie publikacji, praca ta była cytowana przez innych autorów w indeksowanych materiałach konferencyjnych [Faria 2012] w artykule w języku polskim [Kolek 2014], w rozdziale książki [Wang 2016] a także według raportu z bazy Google Scholar w publikacji w języku chińskim [Duan 2013]. Praca ta była również cytowana w rozprawach doktorskich z Uniwersytetu Technicznego w Monachium i Stony Brook New York.

Badanie własności QCL kaskadowych było również tematyką pracy [B7], która nie została włączona do cyklu publikacji, ponieważ czasopismo, w którym została opublikowana nie znajduje się na liście JCR. Z tego też powodu cytowanie tej publikacji [Xia 2013] nie znajduje się w raporcie z bazy Web of Science.

Praca [A3] nie była do tej pory cytowana przez innych autorów. Głównym osiągnięciem tej pracy jest porównanie wyników uzyskanych za pomocą dwóch metod używanych do modelowania transportu elektronowego w QCL: Monte Carlo oraz bilansu a także zaproponowanie metody hybrydowej. Sukces konstrukcji QCL sprawił, że obecnie prace związane z budową takich laserów, w szczególności tych działających w obszarze średniej podczerwieni, przeszły z fazy czystych badań do fazy inżynierii i optymalizacji a także wykorzystania produkcyjnego. Zmienia to grono osób zainteresowanych tą tematyką. Wyniki tej pracy mogą być interesujące dla inżynierów rozwijających oprogramowanie wspierające projektowanie tego typu struktur lub wykorzystujących takie programy. Ciekawym wynikiem tej pracy jest również porównanie czasów obliczeń między dwiema używanymi metodami. Pokazuje ono atrakcyjność podejścia z wykorzystaniem metody MC, która często uważana jest za bardzo wymagającą obliczeniowo.

Uzyskane przeze mnie wyniki w zakresie modelowania QCL były również zauważone przez prof. Wang Qijie z Nanyang Technological University w Singapurze. **W 2012 roku byłem przez niego zaproszony do podjęcia współpracy i prezentacji wyników badań na organizowanych przy jego współudziale konferencjach naukowych.** Niestety z powodu braku możliwości czasowych i finansowych z mojej strony, współpraca taka nie mogła być kontynuowana.

W 2016 roku zostałem zaproszony do napisania rozdziału do monografii na temat QCL. Ostatecznie przedsięwzięcie to nie doszło do skutku, a przygotowany tekst został w 2017 roku opublikowany w formie artykułu przeglądowego [A4] w czasopiśmie Optical and Quantum Electronics. Artykuł ten, według raportu Web of Science, doczekał się w chwili pisania tego autoreferatu, 2 cytowań przez innych autorów. Praca ta została też zacytowana w rozdziale książki [Iotti 2018].

W okresie gdy zajmowałem się modelowaniem QCL znacznie większe zainteresowanie budziły struktury pozwalające na uzyskanie promieniowania w obszarze terahercowym a szczególnie dążenie do uzyskania urządzeń działających w temperaturze pokojowej. Z tego powodu cytowalność prac teoretycznych dotyczących laserów działających w obszarze średniej podczerwieni jest mniejsza niż w przypadku tematyki, nad którą pracowało znacznie więcej badaczy, zwłaszcza tych, zajmujących się wykorzystaniem metod Monte Carlo.

3.3 Podsumowanie wyników składających się na prezentowane osiągnięcie naukowe

Główną osią łączącą tematycznie przedstawiony cykl publikacji jest rozwój i wykorzystanie metody MC w zastosowaniach do badania zachowania elektronów w materiałach używanych w elektronice, takich jak GaAs, grafen, silicen a także w strukturach kwantowych laserów kaskadowych. Drugą cechą wspólną jaką można odnaleźć w przedstawionym cyklu jest skupienie się na zakresie wysokiej gęstości elektronów, dla której takie efekty takie jak zakaz Pauliego albo rozproszenia e-e mają istotne znaczenie i determinują charakterystyki materiału lub wytworzonej struktury.

Główny wkład prezentowanego dorobku naukowego polega na dostarczeniu ulepszonych metod obliczeniowych, które mogą być wykorzystane w fizyce, elektronice, badaniach materiałowych. Krąg badaczy, których te prace mogą zainteresować, sprowadza się głównie do zespołów, które nie tylko prowadzących własne badania z wykorzystaniem technik MC ale przede wszystkim samodzielnie rozwijają tego typu oprogramowanie. Część badaczy korzysta z gotowych kodów nie interesując się szczegółami dotyczącymi używanych metod. Można jedynie ubolewać, że w wielu przypadkach informacje dotyczące metod obliczeniowych są pomijane w publikacjach, co często znacznie utrudnia odtworzenie wyników prac i użycie podobnych technik w innych zastosowaniach. Niewątpliwie zmniejsza to zainteresowanie takimi pracami w innych ośrodkach i wzajemną cytowalność. Należy też zwrócić uwagę, że znaczna część prac była opublikowana stosunkowo niedawno, a skutki zainteresowania tego typu wynikami mogą pojawić się w postaci publikacji dopiero po pewnym czasie.

Uzyskiwane dzięki opracowanym przeze mnie metodom zmniejszenie czasu trwania obliczeń, w niektórych przypadkach rzędu kilkunastu razy, umożliwia przeprowadzenie badań, które były praktycznie niedostępne do tej pory. Niektóre z przeprowadzanych przeze mnie symulacji MC wymagały czasu obliczeń rzędu kilku dni. W przypadku gdyby obliczenia miały trwać kilka tygodni byłoby to trudne do zaakceptowania. Ale nawet w przypadku obliczeń trwających minuty lub godziny, każda redukcja czasu obliczeń programów używanych do modelowania pozwala na bardziej aktywne użycie ich w praktyce naukowej i inżynierskiej. Metody MC używane w elektronice, w szczególności przy komputerowym wsparciu projektowania przyrządów mikroelektronicznych wyszły z obszaru zastosowań czysto akademickich i są wykorzystywane również w komercyjnie dostępnym oprogramowaniu, czego przykładem są produkty firmy Silvaco.

Wymienić można następujące rozszerzenia i ulepszenia metod MC:

1. **Propozycja metody hybrydowej Monte Carlo + Rate Equation do modelowania kwantowych laserów kaskadowych.**
2. **Ulepszona metoda MC pozwalająca w wydajny sposób uwzględnić zakaz Pauliego dla przypadku rozprożeń elektron-fonon.**
3. **Ulepszona metoda MC pozwalająca w wydajny sposób uwzględnić zakaz Pauliego dla przypadku rozprożeń elektron-elektron.**
4. **Przystosowanie metody MC do modelowania rozprożeń elektron-elektron w materiałach z liniową relacją dyspersji.**
5. **Przystosowanie metody MC do modelowania z uwzględnieniem zakazu Pauliego dla przypadku spinowo spolaryzowanego gazu elektronowego.**
6. **Uzyskanie poprawnych formuł opisujących rozproszenia elektron-elektron w materiałach o dwóch dolinach strefy Brillouina.**

Badane przeze mnie zjawiska fizyczne zwykle dobierane były jako ilustracja, pokazująca użyteczność rozwijanych narzędzi obliczeniowych. Tym niemniej, dzięki zastosowaniu tych technik udało się uzyskać kilka interesujących i oryginalnych wyników w zakresie fizyki ciała stałego i fizyki urządzeń mikroelektronicznych.

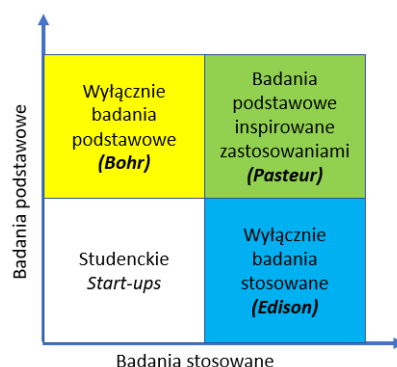
1. **Szczegółowy, mikroskopowy opis transportu elektronowego w strukturze kwantowego lasera kaskadowego pracującego w obszarze średniej podczerwieni. Wyjaśnienie roli poszczególnych poziomów energetycznych i ścieżek przepływu ładunku.**
2. **Opis transportu elektronowego w materiałach dwuwymiarowych, grafenie i silicenie. Wyjaśnienie zależności temperaturowych ruchliwości elektronów i współczynnika dyfuzji dla słabych pól elektrycznych. Wykazanie bezpośredniego wpływu liniowej relacji dyspersji. Wyjaśnienie powstawania ujemnej rezystywności różniczkowej w obszarze silnych pól elektrycznych.**
3. **Pokazanie zależności procesu relaksacji polaryzacji spinowej elektronów w grafenie od początkowego kierunku polaryzacji, zależności od temperatury i przyłożonego pola elektrycznego.**
4. **Pokazanie wpływu efektu wymiany na rozproszenia elektron-elektron i przez to na proces termalizacji w zdegenerowanym, spinowo spolaryzowanym gazie elektronowym w grafenie.**
5. **Opis procesu termalizacji wzbudzonych elektronów i dziur w spinowo spolaryzowanym, zdegenerowanym gazie elektronowym w grafenie.**

Jednym z namacalnych wyników moich dotychczasowych prac są też kody programów komputerowych jakie wytworzyłem. Dalsze prace, w których będą one wykorzystywane, zostały zgłoszone jako tematyka badawcza, w dziedzinie elektroniki dolinowej (valleytronics), rozwijana w Instytucie Elektroniki, Mikroelektroniki i Nanotechnologii Uniwersytetu Lille 1 we Francji.

Pewnego komentarza wymagają, czasami kilkuletnie, przerwy w cyklu zgłaszanych przeze mnie publikacji naukowych. Oprócz wykonywanej przeze mnie pracy zawodowej, nie związanej z działalnością naukową, jest też kilka innych czynników, które moim zdaniem miały na to istotny wpływ. **Po pierwsze wszystkie symulacje MC jakie przeprowadzałem w trakcie mojej działalności naukowej przeprowadzone były z użyciem napisanych przeze mnie programów. Rozszerzanie podejmowanej przeze mnie tematyki badawczej wymagało często wielu miesięcy czy też lat pisania nowych kodów. Było to szczególnie istotne w przypadku zajęcia się modelowaniem MC materiałów 2D i zjawisk elektronowych zależnych od spinu, gdyż w tych dziedzinach ani ja, ani osoby, z którymi współpracuję, nie mieliśmy wcześniejszych doświadczeń.** Nie jest to idealny miernik nakładu na powstanie programów komputerowych, lecz dla przykładu mogę podać, że kody służące do modelowania materiałów 2D to około 10 tyś. linii w języku C/C++, powstałe bez automatycznych generatorów kodu. W przypadku programów służących modelowaniu QCL jest to kilka razy więcej kodu. Innym czynnikiem jest to, że kilka inicjatyw badawczych jakie podejmowałem, co prawda przyniosło obiecujące efekty zgodne ze stanem obecnej wiedzy, ale nie na tyle oryginalne, aby warto było przygotowywać publikacje na ten temat. Mam tu na myśli próby rozszerzenia opisu teoretycznego pozwalającego na modelowanie MC zjawiska dyfuzji z uwzględnieniem oddziaływań kulombowskich elektron-elektron, badania QCL działających w obszarze THz, badania transportu elektronowego w MoS₂, innym budzącym ostatnio zainteresowanie materiale półprzewodnikowym 2D.

Kończąc podsumowanie pragnę dodać kilka uwag o charakterze autorefleksji. Z reguły działalność naukowa prowadzona jest przez osoby zatrudnione na wyższych uczelniach lub w instytutach naukowo-badawczych. Habilitacja stanowiła tam do niedawna kolejny etap w rozwoju naukowym i zawodowym, ukierunkowanym realizacją zadań statutowych jednostki zatrudniającej. Mój

dotychczasowy pracodawca stawia przede mną zadania o charakterze komercyjnym. Swoją pracę naukową wykonuję w czasie wolnym od pracy zawodowej, korzystając z możliwości kontaktu, głównie poprzez Internet, z Politechniką Warszawską i Instytutem Elektroniki, Mikroelektroniki i Nanotechnologii Uniwersytetu w Lille. Praca naukowa jest dla mnie wyzwaniem, przygodą intelektualną i źródłem satysfakcji. Wydaje mi się, że mój przypadek stanowi ewenement w skali krajowej. Moja działalność naukowa nie ma formalnego wsparcia instytucjonalnego i finansowego. Dzięki temu posiadam znaczną autonomię w wyborze problematyki badań, uwarunkowaną jedynie zdobytą wiedzą oraz dostępnym narzędziem badawczym w postaci komputerów firmy, co np. wyklucza badania doświadczalne, wymagające kosztownej aparatury. Nieżyjący już ekspert w zakresie polityki państwa na rzecz rozwoju nauki Donald E. Stokes zaproponował w książce z 1997 roku schemat poglądowy nazwany *kwadrantem Pasteura*. W klasyfikacji Stokesa badania podstawowe to kwadrant Bohra, który oznacza poszukiwanie wiedzy podstawowej, bez zwracania uwagi na jej zastosowania. Badania stosowane reprezentuje kwadrant Edisona, gdzie celem jest stworzenie konkretnego produktu. Kwadrant Pasteura, nawiązujący do badań Louisa Pasteura, obrazuje koncepcję według której badania podstawowe powinny być rozwijane z myślą o rozwiązywaniu konkretnych i aktualnych problemów. Uważam, że podejmując własne badania miałem zawsze na myśli kwadrant Pasteura.



Spór o to, co jest ważniejsze - badania podstawowe czy stosowane – jest zatem w moim przypadku bezprzedmiotowy. Uważam ponadto, że w Polsce, kraju mającym wielkie ambicje i szanse rozwojowe należy, w rozsądnych proporcjach, wspierać różne rodzaje badań, które determinują nasz rozwój cywilizacyjny. W finansowaniu nauki starannie liczy się wydawane pieniądze, szczególnie te pochodzące z kieszeni podatników. Jeśli pojawiają się wartościowe badania na poziomie światowym, nie wymagające nakładów finansowych, powinny zasługiwać na jakąś formę wyróżnienia.

Zgodnie z Konstytucją dla Nauki stopień doktora habilitowanego nie jest zarezerwowany wyłącznie dla osób zatrudnionych w instytucjach akademickich, czy badawczych. Fakt ten ośmielił mnie do podjęcia decyzji o poddaniu mojej dotychczasowej działalności naukowej obiektywnej zewnętrznej ocenie niezależnych ekspertów. Wynik tej oceny jest dla mnie bardzo ważny z punktu widzenia planowania mojej przyszłości naukowej i zawodowej.

Jak już wspominałem, główną inspiracją podejmowanych badań była czysta ciekawość poznawcza. Celem był rozwój metod MC, pozwalających na jak najlepsze uwzględnienie w ramach narzędzi elektroniki i fizyki obliczeniowej zjawisk odpowiedzialnych za transport elektronowy w materiałach i strukturach elektronicznych. Ograniczone kontakty seminaryjne czy też konferencyjne, stanowiące istotne źródło wymiany pomysłów i inspiracji badawczych, niewątpliwie wpływają na mniejszą rozpoznawalność moich prac w środowisku naukowym. Sądzę jednak, że prace jakie publikuję w renomowanych czasopiśmie naukowych świadczą o sensowności moich badań i uczestnictwie w problematyce, która jest przedmiotem zainteresowania fizyków i elektroników.

4. Inne osiągnięcia naukowo badawcze

4.1 Inne prace opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora

4.1.1 W czasopismach znajdujących się w bazie JCR

- [B1] **P. Borowik**, J. L. Thobel, *Monte Carlo calculation of diffusion coefficients in degenerate bulk GaAs*, Semiconductor Science and Technology, 14, 450-453 (1999), IF₁₉₉₀=1.223 [80%]
- [B2] **P. Borowik**, J. L. Thobel, *Monte Carlo method for the investigation of electron diffusion in degenerate semiconductors*, Journal of Applied Physics, 87, 329-333 (2000), IF₂₀₀₀=2.180 [70%]
- [B3] **P. Borowik**, J. L. Thobel, M. Bugajski, L. Adamowicz, *Monte Carlo Studies of Quantum Cascade Lasers*, Acta Physica Polonica A, 116, S-49 (2009) IF₂₀₀₉=0.433 [80%]

4.1.2 W innych czasopismach

- [B4] L. Adamowicz, **P. Borowik**, A. Duduś, M. Kiecana, *Transport of spin polarized electrons in semiconductors: Monte Carlo approach*, Molecular Physics Reports, 39, 13-18 (2004) [30%]
- [B5] **P. Borowik**, L. Adamowicz, J. L. Thobel, *Wykorzystanie metody Monte Carlo do modelowania właściwości struktur kwantowych laserów kaskadowych*, Elektronika: konstrukcje, technologie, zastosowania 51 (10), 96-98 (2010) [90%]
- [B6] **P. Borowik**, L. Adamowicz, J. L. Thobel, *Wykorzystanie metody Monte Carlo do modelowania transportu nośników w strukturach kwantowych laserów kaskadowych*, Elektronika: konstrukcje, technologie, zastosowania 52 (10), 43-45 (2011) [90%]
- [B7] J. Konupek, **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo studies of the band-bending in GaAs/Al_{0.45}Ga_{0.55}As quantum-cascade laser*, Photonics Letters of Poland, 3, 49-51 (2011) [60%]

4.1.3 Główne wyniki innych prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora

Obliczenia, których wyniki zostały przedstawione w pracy [B1] zostały przeprowadzone jeszcze w trakcie przygotowywania przeze mnie pracy doktorskiej. Publikacji została przygotowana i przesłana do wydawnictwa ponad pół roku po uzyskaniu przeze mnie stopnia doktora, tak więc pracę tą wymieniam w tym punkcie.

W przypadku zdegenerowanego gazu elektronowego występuje korelacja między zachowaniem nośników spowodowana przez pośrednie oddziaływanie poprzez zakaz Pauliego. Wartość współczynnika dyfuzji zależy wówczas od koncentracji nośników i może być określona poprzez badanie zachowania małego zbioru nośników dodanych do układu. We wcześniejszej pracy [Thobel 1997], dotyczącej modelowania gazu elektronowego w studni kwantowej, zaproponowana została metoda

obliczeniowa polegająca na równoczesnej symulacji dwóch zespołów cząstek. Dla pierwszego z nich, opisującego tło elektronów o wysokiej gęstości spełnione jest standardowe równanie Boltzmann. Funkcja rozkładu drugiego zespołu, opisującego małą fluktuację, spełnia zlinearyzowaną wersję równania Boltzmann, i ona jest używana do określenia wartości współczynnika dyfuzji. W pracy [B1] metoda ta została zastosowana dla przypadku materiału masywnego – GaAs.

Niestety pierwsza wersja tej metody [Thobel 1997] wiązała się ze znacznym kosztem obliczeniowym. **W pracy [B2] zaproponowana została ulepszona metoda obliczeniowa pozwalająca na znacznie bardziej wydajne obliczanie współczynnika dyfuzji, z redukcją czasu obliczeń rzędu 10–1000 razy, w zależności od rodzaju symulacji. Warto tutaj wspomnieć, że niektóre obliczenia, których wyniki pokazane zostały w tej pracy, nawet z użyciem nowej metody, trwały kilka dni i bez tego podejścia nie można byłoby ich wykonać.**

Wykonane obliczenia pozwoliły między innymi na określenie wpływu degeneracji gazu elektronowego w GaAs na szumy termiczne. Pokazane zostało, że szumy termiczne są silnie zredukowane w warunkach degeneracji. Wyniki pokazują, że współczynnik redukcji szumów termicznych słabo zależy od częstotliwości, lecz szybko maleje wraz z przyłożonym polem elektrycznym.

Obliczenia pozwalające na uzyskanie wartości współczynników dyfuzji, w tym ich zależności od gęstości elektronowej i pola elektrycznego mają istotne znaczenie praktyczne. Współczynniki te są np. używane w modelach dryftu i dyfuzji powszechnie wykorzystywanych do wsparcia projektowania urządzeń mikroelektronicznych. Mają również znaczenie w badaniach nad szumem.

Według raportu z bazy Web of Science publikacja [B1] była cytowana w 2 pracach innych autorów. Jedna z prac [Palenskis 2014] cytujących tą publikację nie jest wymieniana w tym raporcie, prawdopodobnie z powodu błędu w moim nazwisku (Borovik).

Raport z bazy Web of Science odnotowuje 2 cytowania publikacji [B2] przez innych autorów. Praca ta jest również cytowana w raporcie dla U.S. Army Research Office [Joshi 2004], który nie jest widoczny w raporcie Web of Science.

4.2 Prace opublikowane w czasopiśmie znajdujących się w bazie JCR, przed uzyskaniem stopnia doktora

- [C1] **P. Borowik**, S. Goettig, *Monte Carlo study of electron velocity variance in GaAlAs/GaAs/GaAlAs quantum well*, Superlattices and Microstructures, 20, 75-80 (1996), IF₁₉₉₆=0.928 [90%]
- [C2] **P. Borowik**, *Ensemble Monte Carlo study of the influence of plasmon–phonon coupled modes on hot electron transport in GaAs*, Journal of Applied Physics, 82, 4350-4354 (1997), IF₁₉₉₇=1.630 [100%]
- [C3] **P. Borowik**, J. L. Thobel, *Improved Monte Carlo method for the study of electron transport in degenerate semiconductors*, Journal of Applied Physics, 84, 3706-3709 (1998), IF₁₉₉₈=1.729 [80%]

Pierwszym zagadnieniem, którym się zająłem w ramach mojej pracy doktorskiej było modelowanie interakcji elektronów ze sprzężonymi modami fonon-plazmon. Na podstawie studiów literaturowych

zauważyłem, że w dotychczas prowadzonych symulacjach MC, dotyczących transportu elektronów w GaAs nie było uwzględniane, że w przypadku gdy energia plazmonów jest bliska energii fononów powstają wówczas mody sprzężone. **Zaproponowałem nową metodę obliczeniową pozwalającą na uwzględnianie tego zjawiska [C2].**

Kolejnym zagadnieniem, które udało mi się rozwiązać, było wyjaśnienie źródła problemów związanych z powszechnie używaną metodą [Lugli 1985], pozwalającą na uwzględnienie w symulacjach MC efektów związanych z zakazem Pauliego. Standardowe podejście może prowadzić do niefizycznych rozwiązań z funkcją rozkładu $f(k) > 1$, a redukcja błędów wymaga używania w symulacjach bardzo dużej liczby elektronów, co bardzo zwiększa wymagania obliczeniowe. Zaproponowaliśmy wówczas poprawienie tej metody [C3]. Prace wchodzące w skład prezentowanego cyklu [A1, A7] dotyczą podobnej tematyki, ale opierają się na innym pomysle.

Również w przypadku tych prac jestem ich głównym pomysłodawcą i wykonawcą. W publikacjach tych pełniłem również funkcję autora korespondującego.

Według raportu z bazy Web of Science publikacja [C2] była cytowana w 4 pracach innych autorów. W bazie Scopus wymienione jest jeszcze 1 cytowanie tej pracy [Schmielau 2010]. Publikacja ta została również zacytowana w pracy doktorskiej z University of York [Marchetti 2013]. Autor ten nie cytuje tej pracy w swoich innych publikacjach.

Raport z bazy Web of Science odnotowuje 13 cytowań publikacji [C3] przez innych autorów. Raport ten nie zawiera cytowania w rozdziale książki [Ferry 2001].

4.3 Wystąpienia i plakaty na konferencjach naukowych po uzyskaniu stopnia doktora

Na wstępie chciałbym skomentować fakt małego uczestnictwa przeze mnie w konferencjach naukowych. Wynika to głównie z mojej dotychczasowej sytuacji zawodowej. Mam ograniczone możliwości występowania o granty badawcze. Z tego powodu nie mam możliwości finansowania wyjazdów na konferencje ani w nich uczestniczenia poza urlopem wypoczynkowym. Tak więc pomimo uzyskiwania zaproszeń do wygłaszania referatów musiałem odmawiać. Z tych też powodów, w niektórych przypadkach, mimo że byłem głównym autorem prezentowanych treści, prezentacje wyników na konferencjach przeprowadzali współautorzy. Podobna sytuacja dotyczy również braku możliwości odbywania staży w innych ośrodkach naukowych.

4.3.1 Prezentowane osobiście

- [D1] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo versus Rate Equation studies of population inversion in GaAs/Al_{0.45}Ga_{0.55}As quantum-cascade laser*, International Conference on Semiconductor Mid-IR Materials and Optics, SMMO 2010, 21-23.10 2010, Warszawa (prezentacja referatu)
- [D2] J. Konupek, **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo and Rate Equation studies of space-charge effect in GaAs/Al_{0.45}Ga_{0.55}As quantum-cascade laser*, International Conference on Semiconductor Mid-IR Materials and Optics, SMMO 2010, 21-23.10 2010, Warszawa (plakat)

- [D3] **P. Borowik**, L. Adamowicz, J. L. Thobel, *Wykorzystanie metody Monte Carlo do modelowania transportu nośników w strukturach kwantowych laserów kaskadowych*, X Krajowa Konferencja Elektroniki, 05-09.06 2011, Darłówko Wschodnie (prezentacja referatu)
- [D4] **P. Borowik**, J. Konupek, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Solutions of Schrödinger equation for the Monte Carlo simulations of THz quantum cascade lasers*, IV Workshop on Physics and Technology of Semiconductor Lasers, 23-26.10 2011, Kazimierz Dolny (plakat)
- [D5] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo studies of electron relaxation in spin polarized electron gas in monolayer graphene*, European Materials Research Society E-MRS fall meeting, 18-21.09 2017, Warszawa (plakat)

4.3.2 Prezentowane przez współautorów

- [D6] J. L. Thobel, **P. Borowik**, *Improved Monte Carlo model of electron transport and diffusion in degenerate semiconductors*, 11th III-V Semiconductor Device Simulation Workshop, 10-11.05.1999, Lille, (prezentacja referatu)
- [D7] L. Adamowicz, **P. Borowik**, A. Duduś, M. Kiecana, *Monte Carlo approach to transport of spin polarised electrons in semiconductors*, Workshop: Multiphysics Simuations, Lille, December 2007 (wykład)
- [D8] **P. Borowik**, J. L. Thobel, M. Bugajski, L. Adamowicz, *Monte Carlo Studies of Quantum Cascade Lasers*, III National Conference on Nanotechnology NANO 2009, 22-26.06 2009, Warszawa (prezentacja referatu)
- [D9] **P. Borowik**, L. Adamowicz, J. L. Thobel, *Wykorzystanie metody Monte Carlo do modelowania właściwości struktur kwantowych laserów kaskadowych*, IX Krajowa Konferencja Elektroniki, 30.05-02.06 2010, Darłówko Wschodnie (prezentacja referatu)
- [D10] J. L. Thobel, O. Bonno, L. Adamowicz, **P. Borowik**, J. Konupek, A. Hamadou, S. Lamari, *Modelling of Quantum Cascade Lasers: From Monte Carlo simulations to rate-equations-based models*, IV Workshop on Physics and Technology of Semiconductor Lasers, 23-26.10 2011, Kazimierz Dolny (referat zaproszony)
- [D11] **P. Borowik**, J. L. Thobel, L. Adamowicz, *Monte Carlo study of electron transport in materials with linear bands, application to silicene and graphene*, European Materials Research Society E-MRS spring meeting, 02-06.05 2016, Lille, France (plakat)

4.4 Udział w projektach badawczych

Po uzyskaniu przeze mnie stopnia doktora, pomimo podjęcia pracy zawodowej poza instytucjami badawczymi starałem się, o ile to było możliwe, włączać się w działania naukowe podejmowane na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej, w tym również uczestnicząc w projektach naukowych.

1. W latach 2001-2003 brałem udział w realizacji zamawianego projektu badawczego PBZ/KBN/044/P03/2001 „Elektronika spinowa: Nowe materiały i struktury dla spintroniki, w tym tlenki i półprzewodniki magnetyczne z temperaturą Curie powyżej 300K”. Tytuł

zrealizowanej części projektu: „*Nowe materiały dla spintroniki – półprzewodniki grupy III-V z metalami przejściowymi*”. Kierownik projektu: prof. dr hab. A. Twardowski, IFD UW; uczestnicy: Instytut Fizyki Doświadczalnej, Uniwersytet Warszawski; Wydział Fizyki i Wydział Chemii Politechnika Warszawska, Instytut Technologii Materiałów Elektronicznych.

Ze względu na uwarunkowania formalne była to praca w ramach wolontariatu, bez pobieranego wynagrodzenia. Mój udział polegał na przygotowaniu kodów komputerowych MC pozwalających na modelowania zjawisk spintronicznych w GaAs. Następnie obliczenia wykonywane były przy współudziale dwójki studentów realizujących swoje prace magisterskie. Brałem udział w opiece naukowej nad tą działalnością.

2. W latach 2007-2011 byłem jednym z wykonawców projektu badawczego: „*Zaawansowane technologie dla półprzewodnikowej optoelektroniki podczerwieni*”. Grant zamawiany przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju PBZ-MNiSW-02/1/2007. Kierownik projektu prof. dr hab. M. Bugajski, ITE; uczestnicy: Instytut Technologii Elektronowej; Instytut Technologii Materiałów Elektronicznych; VIGO Systems S.A, Wojskowa Akademia Techniczna, Wydział Nowych Technologii i Chemii; Wojskowa Akademia Techniczna, Instytut Optoelektroniki; Politechnika Warszawska, Wydział Fizyki; Politechnika Łódzka Instytut Fizyki, Wydział Fizyki, Informatyki i Matematyki Stosowanej; Politechnika Wrocławska, Wydział Podstawowych Problemów Techniki (WPPT), Instytut Fizyki; Politechnika Rzeszowska, Wydział Elektrotechniki i Informatyki, Katedra Podstaw Elektroniki.

Byłem głównym wykonawcą zadania, realizowanego na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej: „*Modelowanie transportu nośników w kwantowych laserach kaskadowych*”. W ramach przygotowań do tego projektu badawczego, w latach 2005 i 2007 gościłem na Uniwersytecie w Lille (pobyty 2 tygodniowe) w celu zapoznania się z tematyką modelowania QCL. Wyjazdy te były sfinansowane przeze mnie i z punktu widzenia administracyjnego nie miały oficjalnego statusu. Byłem współautorem wniosku o grant badawczy w zakresie realizowanego zadania. Przygotowałem kody komputerowe służące do realizacji tego projektu badawczego oraz przeprowadziłem obliczenia. Wyniki badań prezentowałem na cyklicznych spotkaniach projektowych, na konferencjach naukowych oraz w formie artykułów.

3. Przed uzyskaniem stopnia doktora byłem wykonawcą grantu badawczego (grant promotorski) przyznanego przez Komitet Badań Naukowych, sekcja elektroniki, numer: 8 T11B 047 13, dotyczącego przygotowywanej przeze mnie pracy doktorskiej.
4. W trakcie studiów doktoranckich byłem również głównym wykonawcą grantu badawczego przyznanego przez dyrektora Instytutu Fizyki Politechniki Warszawskiej dotyczącego prowadzonych przeze mnie prac z wykorzystaniem metody MC. Grantem tym zgodził się wówczas kierować dr. S. Goettig, gdyż mój status doktoranta nie pozwalał na pełnienie takiej roli.

4.5 Recenzowanie artykułów w czasopismach naukowych

Przygotowałem recenzje artykułów zgłoszonych do następujących czasopism

- 2 recenzje dla *Journal of Applied Physics* (2011, 2014)
- 1 recenzja dla *Applied Physics Letters* (2018)
- 1 recenzja dla *Physica Status Solidi B* (2018)

4.6 Działalność dydaktyczna i zawodowa

W trakcie mojej pracy badawczej podtrzymywałem aktywne kontakty z Wydziałem Fizyki Politechniki Warszawskiej i miałem kilka okazji uczestniczyć w opiece naukowej nad studentami. Działalność ta miała formę wolontariatu, gdyż nie pobierałem za to wynagrodzenia.

- Dwójka studentów A. Duduś (2003) i M. Kiecana (2003) wykorzystywała moje kody MC do modelowania efektów spintronicznych w GaAs. Brałem również udział w określaniu tematyki tych badań i doradzałem w trakcie przygotowywania przez nich prac magisterskich. Oceniam mój udział w opiece nad tymi magistrantami na 50%.
- Podobny udział miałem w opiece nad przygotowaniem pracy magisterskiej przez B. Ślusarskiego (2007), dotyczącej modelowania QCL.
- **W 2012 roku byłem promotorem pracy magisterskiej J. Konupka dotyczącej badań nad QCL. Praca została oceniona na bardzo dobrą a magistrant ukończył studia z wyróżnieniem.**

W 2011 roku zostałem zaproszony do prowadzenia na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej wykładu oraz laboratorium komputerowego: *Programowanie w języku SAS 4GL*. Prowadziłem te zajęcia w latach 2011–2014 jako przedmiot obieralny dla studentów 4 i 5 roku oraz doktorantów.

Tym niemniej, większość mojej działalności zawodowej i dydaktycznej miała miejsce poza instytucjami akademickimi, w dziedzinie IT i biznesu.

W 2013 roku byłem zaproszony do wygłoszenia wykładu inauguracyjnego na studiach podyplomowych prowadzonych w Szkole Głównej Handlowej. Prowadziłem również wykłady na studiach podyplomowych prowadzonych na Wydziale Zarządzania Uniwersytetu Warszawskiego oraz w Szkole Głównej Handlowej.

Przez kilka lat prowadziłem w firmie, w której pracuję, szkolenia, między innymi z zaawansowanych metod analizy danych (Data Mining, Business Intelligence), dla firm z sektorów bankowości, ubezpieczeń, telekomunikacji, energetyki, a także wykładowców uczelni wyższych. W 2017 roku byłem organizatorem i jednym z prowadzących internetowego cyklu webinarów, przeznaczonego dla studentów, dotyczących programowania w języku SAS 4GL.

Byłem opiekunem 3 studentów odbywających praktyki zawodowe w SAS Institute.

Miałem powyżej 30 wystąpień na konferencjach organizowanych przez SAS Institute oraz powyżej 10 wystąpień na innych branżowych konferencjach informatyczno-biznesowych.

Od 16 lat jestem współorganizatorem corocznej konferencji branżowej *SAS Forum Technologii* (około 200-300 uczestników). Od 5 lat odpowiadam za zawartość merytoryczną tej konferencji. W niektórych latach konferencja jest łączona z konferencją *SAS Forum Biznesowe* (ostatnio łącznie około 1000

uczestników). Jestem współorganizatorem konferencji *SAS dla Administratorów i Praktyków* (około 100-150 uczestników).

Brałem udział w kilkunastu projektach informatycznych prowadzonych przez SAS Institute dla swoich klientów, głównie w roli doradczej i eksperckiej dotyczącej technologii informatycznych oraz pomagając wypracowywać odpowiednie architektury systemów informatycznych.

5. Literatura

- [Bugajski 2014] M. Bugajski, A. Wójcik-Jedlińska, *Kwantowe lasery kaskadowe – 20 lat historii i stan obecny*. *Elektronika*, 11, 10-17, (2014)
- [Castro Neto 2009] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. *The electronic properties of graphene*. *Review of Modern Physics*, 81, 108 (2009).
- [Donovan 2001] K. Donovan, P. Harrison, R. W. Kelsall. *Self-consistent solutions to the intersubband rate equations in quantum cascade lasers: analysis of a GaAs/Al_xGa_{1-x}As device*. *J. Appl. Phys.* 89, 3084–3090 (2001)
- [Duan 2013] Duan Su-qing, Chu Wei-dong, Yang Ning, Li Yan-fang, *Design of the active region gain of the terahertz quantum cascade lasers*, *Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology*, vol 11 no 1 Feb 2013, <http://www.cqvip.com/qk/93511a/201301/45152929.html>
- [Faist 1994] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, A. Y. Cho. *Quantum cascade laser*. *Science*, 264, 553–556 (1994)
- [Faria 2013] R. Faria, O. Hassan, F. Hayee, M. S. H. Sohel, A. Ahmed, M. A. Talukder, *Study of Design-Dependent Electroluminescence Linewidth of Quantum Cascade Lasers*. *Photonics Global Conference (PGC), 2012, Singapore, IEEE Xplore: 11 February 2013, INSPEC Accession Number: 13291843, DOI: 10.1109/PGC.2012.6457942*
- [Fatholouloumi 2012] S. Fatholouloumi, E. Dupont, C. W. I. Chan, Z. R. Wasilewski, S. R. Laframboise, D. Ban, A. Mátyás, C. Jirauschek, Q. Hu, and H. C. Liu, *Terahertz quantum cascade lasers operating up to ~200 K with optimized oscillator strength and improved injection tunneling*, *Opt. Express*, 20, 3866 (2012)
- [Ferry 2001] D.K. Ferry, S.M. Goodnick, *Ensemble Monte Carlo Simulations of Ultrafast Phenomena in Semiconductors*. In: Tsen KT. (eds) *Ultrafast Phenomena in Semiconductors*. Springer, New York (2001) https://doi.org/10.1007/978-1-4613-0203-2_6
- [Iotti 2001] R. C. Iotti, F. Rossi. *Nature of charge transport in quantum-cascade lasers*. *Physical Review Letters* 87, 146603 (2001).
- [Iotti 2018] R. C. Iotti, F. Rossi. *Monte Carlo Kinetic Modeling of the Combined Carrier-Phonon Nonequilibrium Dynamics in Semiconductor Heterostructure Devices*. Rozdział w: *Phonons in Low Dimensional Structures*, IntechOpen (2018) <https://cdn.intechopen.com/pdfs/63300.pdf>
- [Joshi 2004] R. P. Joshi, *Monte Carlo Transport Studies of GaN High Electron Mobility Transistors (HEMTs) for Microwave Applications*, (2004), report for U. S. Army Research Office, <http://www.dtic.mil/dtic/tr/fulltext/u2/a421515.pdf>
- [Kolek 2014] A. Kolek, *Modelowanie transportu elektronów w kwantowych laserach kaskadowych*, *Elektronika : konstrukcje, technologie, zastosowania*, (2014), Vol. 55, nr 11, 18-26.
- [Kosiel 2009] K. Kosiel, M. Bugajski, A. Szerling, J. Kubacka-Traczyk, P. Karbownik, E. Pruszyńska-Karbownik, J. Muszalski, A. Łaszcz, A. Romanowski, M. Wasiak, W. Nakwaski, I.

- Makarowa, P. Perlin, *77 K operation of AlGaAs/GaAs quantum cascade laser at 9 μm* . Photonics Letters of Poland, 1, 16–18 (2009)
- [Lei 2018] W. Lei, *A fast spectral method for the Uehling-Uhlenbeck equation for quantum gas mixtures: homogeneous relaxation and transport coefficients*. <https://arxiv.org/abs/1810.03090>
- [Li 2010] X. Li, E. A. Barry, J. M. Zavada, M. Buongiorno Nardelli, K. W. Kim, *Influence of electron-electron scattering on transport characteristics in monolayer graphene*. Applied Physics Letters 97, 082101 (2010)
- [Lugli 1985] P. Lugli, D. K. Ferry, *Degeneracy in the Ensemble Monte Carlo method for high-field transport in semiconductors*, IEEE Transactions on Electron Devices. ED-32, 2431 (1985).
- [Lugli 1989] P. Lugli, C. Jacoboni, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*. Springer, Wien, (1989)
- [Luo 2017] Y. K. Luo, J. Xu, T. Zhu, G. Wu, E. J. McCormick, W. Zhan, M. R. Neupane, R. K. Kawakami. *Opto-Valleytronic Spin Injection in Monolayer MoS₂/Few-Layer Graphene Hybrid Spin Valves*. Nano Letters, 17, 3877-3883 (2017)
- [Marchetti 2013] Gianni Marchetti, *The role of electron-electron scattering in spin transport for a GaAs semiconductor in the nondegenerate regime*, thesis, Department of Physics, University of York, (2013). <http://etheses.whiterose.ac.uk/5134/1/thesis.pdf>
- [Novoselov 2004] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov. *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*. Science, 306, 666-669 (2004)
- [Oughaddou 2015] H. Oughaddou, H. Enriquez, M. R. Tchalala, H. Yildirim, A. J. Mayne, A. Bendounan, G. Dujardin, M. A. Ali, A. Kara, *Silicene, a promising new 2D material*. Progress in Surface Science, 90, 46-83 (2015)
- [Page 2001] H. Page, C. Becker, A. Robertso, G. Glastre, V. Ortiz, C. Sirtori. *300 K operation of a GaAs-based quantum-cascade laser at $\lambda \approx 9\mu\text{m}$* . Applied Physics Letters, 78, 3529–3531 (2001)
- [Palenskis 2014] V. Palenskis, *Transport of Electrons in Donor-Doped Silicon at Any Degree of Degeneracy of Electron Gas*. World Journal of Condensed Matter Physics, 4, 123-133 (2014). <http://dx.doi.org/10.4236/wjcmp.2014.43017>
- [Roche 2015] S. Roche, J. Akerman, B. Beschoten, J. C. Charlier, M. Chshiev, S. P. Dash, B. Dlubak, J. Fabian, A. Fert, M. Guimaraes, F. Guinea, I. Grigorieva, C. Schonberger, P. Seneor, C. Stampfer, S. O. Valenzuela, X. Waintal, B. van Wees. *Graphene spintronics: the European Flagship perspective*. 2D Materials, 2, 030202 (2015).
- [Romano 2015] V. Romano, A. Majorana, M. Coco, *DSMC method consistent with the Pauli exclusion principle and comparison with deterministic solutions for charge transport in graphene*, Journal of Computational Physics 302, 267 (2015).
- [Saint-Martin 2005] Jérôme Saint-Martin, *Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de MOSFET ultracourts a grille multiple sur soi*, thesis, Université Paris Sud - Paris XI, 2005, Spécialité Electronique, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00011335/>
- [Schaibley 2016] J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao, X. Xu, *Valleytronics in 2D materials*. Nature Review Materials, 1, 16055 (2016)
- [Schmielau 2010] T. Schmielau, M.F. Pereira, *Predictive microscopic approach to transport in THz quantum cascade lasers*, Journal of Physics: Conference Series, 242, 012009 (2010)
- [Shishir 2009] R. S. Shishir, D K Ferry. *Velocity saturation in intrinsic graphene*. Journal of Physics: Condensed Matter 21, 344201 (2009).

- [Tao 2015] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, D. Akinwande. *Silicene field effect transistors operating at room temperature*. Nature Nanotechnology, 10, 227 (2015)
- [Thobel 1997] J. L. Thobel, A. Sleiman, R. Fauquembergue, *Determination of diffusion coefficients in degenerate electron gas using Monte Carlo simulation*. Journal of Applied Physics, 82, 1220 (1997)
- [Wacker 2002] A. Wacker, *Gain in quantum cascade lasers and superlattices: a quantum transport theory*. Physical Review B. 66, 085326 (2002).
- [Wang 2016] Q. J. Wang, T. Liu, Microscopic many-body theory for terahertz quantum cascade lasers, Advances in Imaging and Sensing, pp. 37-59 CRC Press, ISBN: 978-149871476-1;978-149871475-4 DOI: 10.1201/9781315371283 (2016)
- [Willis 2010] Kelly Willis, *EMC/FDTD/MD for Multiphysics characterization of semiconductors at THz frequencies*, thesis, University of Wisconsin–Madison (Electrical Engineering) 2010 <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.711.5103&rep=rep1&type=pdf>
- [Xia 2013] Z. Xia, Y. Wu, Surface scattering resonance absorption of free electron in nano structured materials. Optik 124(21), pp. 5030-5033 (2013)
- [Zhao 2016] J. Zhao, H. Liu, Z. Yu, R. Quhe, S. Zhou, Y. Wang, C. C. Liu, H. Zhong, N. Han, J. Lu, Y. Yao, K. Wu, *Rise of silicene: A competitive 2D material*. Progress in Materials Science 83, 24-151 (2016).

Piotr Borowik