

# Streszczenie

Inżynieria struktury elektronowej krysztalów z grupy IV do zastosowań w optoelektronice – obliczenia *ab initio*

Norbert Janik

Politechnika Wroclawska

Niniejsza rozprawa dotyczy teoretycznych badań wpływu różnych typów inżynierii struktury elektronowej na elektronowe własności materiałów półprzewodnikowych z grupy IV. Celem rozprawy jest znalezienie takich układów, które pozwolą na zastosowanie w optoelektronice.

Cztery metody wpływu na własności materiałów zostały zaprezentowane wraz z opisem jak krok po kroku przeprowadzać obliczenia, aby uzyskać porządane wyniki. W przypadku niektórych etapów obliczeń konieczne były szczegółowe wyjaśnienia ze względu na trudności związane z interpretacją lub sposobem przeprowadzania pewnych obliczeń. Dla każdej z wymienionych metod: odkształceń, stopów, zmian strukturalnych oraz czynnika przestrzennego, najważniejsze efekty fizyczne zostały pokazane wraz z wyjaśnieniem mechanizmów nimi sterujących. Także, dla materiałów, których własności pozwalają na zastosowanie w optoelektronice, najważniejsze parametry aplikacyjne (jak masy efektywne czy mobilność ładunku) zostały oszacowane.

Dodatkowo do zaprezentowanych wyników wraz z analizą, rozprawa zawiera rozszerzony wstęp teoretyczny powiązany z poruszonymi zagadnieniami. Na koniec, w załączniku znaleźć można użyteczne wyprowadzenia stosowane w pracy.