

Streszczenie pracy doktorskiej pt. “Badania obliczeniowe z zasad pierwszych kryształów półprzewodnikowych o strukturze wurcytu i blendy cynkowej do zastosowań w optoelektronice”

Celem niniejszej pracy doktorskiej było zbadanie różnych politypów półprzewodników grupy IV i III-V za pomocą numerycznego modelowania teoretycznego. W tym celu zastosowano szeroki wachlarz technik obliczeniowych bazując na teorii funkcjonału gęstości. Wyniki zostały przeanalizowane oraz porównane z aktualnym stanem wiedzy. Szerokie spektrum badanych materiałów i właściwości pozwoliło na przedyskutowaniu najważniejszych trendów chemicznych.

Pierwszy rozdział stanowi opis metody badawczej. Z podstawowego hamiltonianu wielociałowego wyprowadzono metodę DFT, przedstawiono twierdzenie Hohenberga-Kohna i równania Kohna-Shama. Następnie omówiono najważniejsze przybliżenia stosowane w DFT. W końcu krótko opisano model κ p stosowany w tej pracy oraz badaną grupę materiałową.

W drugim rozdziale zbadano właściwości półprzewodników III-V w strukturze krystalograficznej blendy cynkowej oraz wurcytu. Na początku wyznaczono właściwości fizyczne takie jak parametry geometryczne, energię formacji, stałe elastyczne oraz piezoelektryczne. Przeprowadzono obszerną dyskusję właściwości elektronowych czyli struktur pasmowych, przerw wzbronionych, rozszczepień pasm czy względnego położenia pasm. Opisano także wpływ naprężeń na strukturę pasmową.

W trzecim rozdziale przeprowadzono kompleksowe badanie czterech faz krystalograficznych półprzewodników grupy IV oraz ich związków binarnych. Wyznaczono równowagowe geometrie oraz współczynniki sprężystości objętościowej, użyto wcześniej zaproponowanego modelu do opisu stabilności różnych politypów. Również tutaj duży nacisk został położony na analizę właściwości elektronowych, z uwzględnieniem przerw wzbronionych. Przeprowadzono przegląd materiałów pod względem ich potencjalnego zastosowanie w optoelektronice, uwzględniając aktualny stan wiedzy w tym zakresie.

W ostatnim rozdziale zbadano wpływ mieszania azotku galu z różnymi atomami z grupy III i V na strukturę elektronową. W tym celu użyto metody superkomórkowej połączonej z specjalnymi strukturami quasilosowymi oraz metodą odwijania struktury pasmowej. Analiza pokazała, że zastępowanie azotu innymi atomami grupy V wprowadza w przerwie nowe stany, co dla przypadku mieszania z arsenem zostało potwierdzone eksperymentalnie. Z drugiej strony zastępowanie galu przez glin i aluminium nie wprowadza żadnych nowych stanów, zmienia jedynie przerwę wzbronioną. Efekt został wytłumaczony poprzez dystorsję geometrii struktury GaN przez atomy grupy V. Jako powód wskazano różnicę w wielkościach atomów oraz elektroujemnościach.