

Struktura elektronowa mocno niedopasowanych związków półprzewodnikowych pod kątem zastosowania ich w przyrządach optoelektronicznych

Autor: mgr inż. Maciej Polak

Promotor: prof. Robert Kudrawiec

Kopromotor: prof. Oleg Rubel

Streszczenie

Mocno niedopasowane stopy półprzewodnikowe (HMAs), w szczególności rozrzedzane bizmutki, są stosunkowo nową grupą materiałów. Określenie mocno niedopasowane, związane jest z różnicami w wielkości i elektroujemności atomów w mieszanych związkach. W konsekwencji materiały te wykazują wyjątkowe właściwości, znacznie różne od tych które obserwowane są dla tradycyjnych stopów półprzewodnikowych, takie jak znaczna redukcja przerwy energetycznej przy niewielkiej zawartości bizmutu i znaczące zmiany w elektronowej strukturze pasmowej. Stopy z bizmutem są jedyną drogą do uzyskania materiałów z grupy III-V o przerwie energetycznej niższej niż przerwa InSb, co jest niezwykle istotne ze względu na możliwe zastosowania w urządzeniach na zakres podczerwieni, w szczególności w laserach. W związku z koniecznością zmian w warunkach wzrostu tych materiałów, pojawiać się w ich strukturze mogą zwiększone ilości niechcianych defektów. Dotychczasowy stan wiedzy na temat elektronowej struktury pasmowej tych materiałów oraz właściwości defektowych jest bardzo ograniczony. Spójna i obszerna praca dotycząca struktury pasmowej oraz właściwości defektowych stanowiła by duży wkład w zrozumienie tych materiałów i pomogła w interpretacji wyników oraz projektowaniu materiałów.

Prezentowana praca doktorska zawiera całkowicie nowe i szczegółowe obliczenia z zasad pierwszych dla materiałów III-V-Bi. Zostały przebadane wszystkie materiały III-V naturalnie występujące w strukturze blendy cynkowej tj. AlPBi, AlAsBi, AlSbBi, GaPBi, GaAsBi, GaSbBi, InPBi, InAsBi oraz InSbBi. Najnowocześniejsze metody obliczeniowe z zasad pierwszych zostały zastosowane do dokładnego opisu struktury pasmowej i zostały wyznaczone na ich podstawie parametry opisujące zachodzące zmiany.

Obliczenia struktury pasmowej zostały następnie poszerzone o badania defektów w tych układach. Defekty punktowe oraz pary defektów były brane pod uwagę, dla materiałów o niskiej zawartości bizmutu. Użyte zostały najdokładniejsze dostępne techniki obliczeniowe takie jak funkcjonały hybrydowe i poprawki elektrostatyczne do energii formowania a następnie zbudowany został model do przewidywania wyników na podstawie mniej kosztownych obliczeń. Wyniki zostały zebrane w formie wykresów i tabel, oraz przedyskutowane zostały chemiczne trendy występujące w tych materiałach pod kątem stosowalności tych związków w urządzeniach optoelektronicznych.