

## **Projekt 6.2. Zastosowanie i rozwój metod ab initio do wyznaczania własności powierzchni i struktur kwantowych azotków metali grupy III**

**Promotor:** dr hab. Paweł Strąk

**Instytut:** IWC PAN

**Jednostka organizacyjna:** NL-3

**www:** <http://www.unipress.waw.pl>

### **Opis:**

1. Metody ab initio zostaną zastosowane do wyznaczenia własności fizycznych polarnych i niepolarnych powierzchni półprzewodników AlN, GaN i InN. W ramach tych badań zostaną wyznaczone podstawowe własności fizyczne niepolarnych i półpolarnych powierzchni azotków: struktura (w tym rekonstrukcje), własności elektronowe, w tym pinningowanie poziomu Fermiego i ich wpływ na podstawowe procesy adsorpcji na tych powierzchniach.

2. Wyznaczone zostaną podstawowe własności wielo-studni kwantowych w rozmiarze, takim jak stosowanym przy konstrukcji urządzeń LED, LD i HEMT. Modelowanie obejmie polarne i niepolarne struktury azotków czystych i opartych na układach roztworów stałych. Otrzymane wyniki obejmą: wyniki elektryczne takie jak rozkład pól elektrycznych, ekranowanie, oraz optyczne takie jak siła oscylatora, prawdopodobieństwo przejść optycznych, decydujące dla zastosowań. Wyniki zostaną zastosowane głównie do symulacji struktur pracujących w zakresie bliskiego i dalekiego UV.

3. Zaprogramowanie i rozwój teorii funkcjonału amplitudy-fazy, która oparta jest na równaniach mechaniki kwantowej i pozwoli rozwiązywać problemy układów wielocząstkowych przy mniejszym wysiłku obliczeniowym niż teoria DFT. Mniejsza złożoność obliczeniowa pozwoli na symulację większych systemów, tj. stopni atomowych kryształów lub większej powierzchni urządzeń elektronicznych. Praca badawcza obejmuje implementacje nowej metody dla układów atomowych, molekularnych i kryształów.

Realizacja – student wybiera jedno lub więcej zagadnień.

### **Cel projektu:**

Celem naukowym projektu jest realizacja trzech zagadnień: (i) wyznaczanie własności i modelowanie procesów molekularnych na powierzchniach azotków AlN, GaN i InN, (ii) wyznaczenie własności studni kwantowych opartych o AlN, GaN i InN, (iii) konstrukcja i rozwój nowych metod badawczych opartych o teorię funkcjonału amplitudy-fazy. Do celów należy modelowanie procesów budowy struktur oraz przewidywanie ich własności do budowy urządzeń: elektroluminescencyjne diody LED, diody laserowe LD i detektory promieniowania elektromagnetycznego. Student będzie mógł wybrać jedno lub więcej zagadnień.

### **Wymagania:**

- symulacje DFT, doświadczenie w analizie danych
- licencjat lub magister lub odpowiednie doświadczenie zawodowe
- umiejętności pisania i mówienia w języku angielskim
- doświadczenie w programowaniu w C / C ++ w środowisku Linux
- znajomość języka skryptowego, jednego z Python, Perl, bash, cs