

Projekt 6.3. Zastosowanie obliczeń ab initio do modelowania własności elektrycznych układów dwu-wymiarowych GaN-grafen do zastosowań w przyrządach THz

Promotor: Prof. dr hab. Stanisław Krukowski

Instytut: IWC PAN

Jednostka organizacyjna: NL-3

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

Opis:

Układy polarne GaN-grafen budowane na bazie polarnych powierzchni GaN oraz grafenu jedno- i wielowarstwowego będą badane za pomocą modelowania ab initio. GaN ma dwie powierzchnie polarne: galową i azotową o znacząco różnych własnościach elektrycznych, co jest spowodowane ich polarnością. Obecne technologie pozwalają na otrzymywanie segmentów płaskich co umożliwi uzyskanie atomowej płaskiej powierzchni kontaktu GaN i grafenu. W wyniku tego możliwe jest skonstruowanie 2-D obszarów kontaktu powierzchni GaN oraz grafenu. Powierzchnie półprzewodników podlegają szeregu różnym zmianom, takim jak rekonstrukcja i relaksacja oraz ponadto adsorbują atomy obce. Zmienia to drastycznie ich własności elektryczne.

Modelowanie tych układów będzie oparte na znajomości zarówno powierzchni GaN jak i warstw grafenu jedno- i wielowarstwowego w różnych ułożeniach, w tym AA, ABAB, ABCABC oraz AA'. Obliczenia ab initio zostaną użyte do wyznaczenia własności krystalograficznych czystej powierzchni kontaktu GaN-grafen, w przypadku różnych rekonstrukcji oraz wpływu obecności innych atomów, w tym atomów obcych. Zastosowanie metod rozwiniętych w naszej grupie badawczej pozwoli na otrzymywanie własności krystalograficznych jak i elektrycznych. W szczególności zostaną otrzymane profile potencjału, całki przekrycia, stany ładunkowe defektów powierzchniowych oraz pinning poziomu Fermiego. Wpływ innych atomów pozwoli na zaproponowanie ich użycia w technologii otrzymywania gazu 2-DEG optymalnej dla THz.

Cel projektu:

Celem jest wyznaczenie podstawowych własności elektrycznych układu GaN-grafen, za pomocą obliczeń ab initio. Wyznaczone zostaną profile potencjału elektrycznego w sąsiedztwie powierzchni kontaktu GaN-grafen w przypadku kontaktu elektrycznego oraz izolacji elektrycznej warstwy grafenu i powierzchni GaN. Adsorpcja wodoru, tlenu, węgla, cezu jak i innych atomów w dramatyczny sposób zmienia sprzężenie tych układów i ich własności: praca wyjścia, energia jonizacji czy powinowactwo elektronowe.

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