

Projekt 6.1 Modelowanie ab initio defektów punktowych w półprzewodnikach azotkowych

Promotor: Prof. dr hab. Michał Boćkowski / promotor pomocniczy: Dr Paweł Kempisty

Instytut: Instytut Wysokich Ciśnień PAN

Laboratorium: Laboratorium Krystalizacji (NL-3)

www: www.unipress.waw.pl

Opis:

Projekt będzie miał charakter badań teoretycznych poświęconych termodynamice defektów punktowych w azotku galu. Powszechnie wiadomo, że w eksperymentach obserwuje się silną zależność koncentracji defektów punktowych od orientacji krystalograficznej powierzchni na której prowadzony jest wzrost. Natomiast większość modeli teoretycznych bazuje na równowagowym modelu objętościowym. Pionierski aspekt tego projektu będzie polegał na analizie zachowania wybranych defektów punktowych w nanometrycznych obszarach najbliższych powierzchni. W projekcie badane będą zjawiska zachodzące na poziomie atomowym. Główne prace będą prowadzone w oparciu o symulacje kwantowo-mechaniczne z pierwszych zasad oraz prawa fizyki statystycznej i termodynamiki. Podstawowe obliczenia zostaną wykonane w oparciu o teorię funkcjonału gęstości elektronowej DFT. Wyniki będą obejmowały poziomy energetyczne defektów, energie ich tworzenia oraz bariery na dyfuzję. Dodatkowo określona zostanie zmiana energii swobodnych w funkcji temperatury, korzystając z widm fononowych policzonych także przy użyciu metody DFT. Badania będą dotyczyły kilku ważnych z technologicznego punktu widzenia domieszek: Ge, Mg i C. Kontrolowanie tych domieszek ma kluczowe znaczenie dla uzyskania wysokiej jakości GaN o przewodnictwie typu n (elektronowego), typu p (dziurowego) i materiału nieprzewodzącego. Dodatkowo analiza obejmie domieszkowanie atomami pierwiastków z grupy V: As i P oraz ich kodomieszkowanie z Mg. Planujemy porównać właściwości elektroniczne i energie tworzenia tych samych defektów przy powierzchniach o różnych orientacjach krystalograficznych i w warunkach wzrostu różnymi metodami epitaksjalnymi.

Cel projektu:

Projekt jest zorientowany na udoskonalenie modeli wzrostu i domieszkowania GaN. Defekty punktowe w kryształach podlegają podstawowym zasadom termodynamiki, a projekt pozwoli je dokładniej poznać. Badania dostarczą podstawowych parametrów termodynamicznych oraz informacji, które nie są łatwo dostępne w eksperymentach wzrostu, np. związek między mikroskopowym stanem powierzchni a możliwością wprowadzenia obcych atomów do kryształu lub zasad wyboru preferowanego położenia sieciowego defektu.

Wymagania:

- ukończone studia wyższe na kierunku fizyka, inżynieria materiałowa, chemia, inżynieria obliczeniowa, lub pokrewne,
- znajomość fizyki ciała stałego, fizyki półprzewodników, mechaniki kwantowej, termodynamiki i fizyki statystycznej,
- umiejętność pracy w systemie Linux i programowania w języku Python/C/Fortran,
- znajomość języka angielskiego w stopniu pozwalającym na rozumienie literatury fachowej, prezentację wyników oraz tworzenie własnych publikacji naukowych.