

## Popularnonaukowe streszczenie projektu

Mimo postępu w fizyce i technologii półprzewodników (grupy związków III-V, II-VI) krzem i german (grupa IV) są ciągle wiodącymi materiałami we współczesnych układach elektronicznych produkowanych masowo. Decydują o tym wieloletnie doświadczenia przemysłowe i stosunkowo niskie koszty technologii. Fakt ten w połączeniu ze współczesnymi wyzwaniem optoelektroniki związanymi z rozwojem telekomunikacji światłowodowej (emitery i detektory światła) powoduje, że poszukuje się materiałów dających się łatwo integrować z układami opartymi na Si lub Ge, a jednocześnie posiadającymi pożądane właściwości, jak np. wysoka efektywność fotoemisji, czy duże ruchliwości nośników. Niestety zarówno Si jak i Ge posiadają skośną przerwę energetyczną, co powoduje niską efektywność optycznej generacji i rekombinacji nośników. Wiadomo jednak, że odpowiednie domieszkowanie germanu pierwiastkami grupy IV, oraz wprowadzanie naprężeń może prowadzić do korzystnej z punktu widzenia optoelektroniki modyfikacji struktury elektronowej. Odkrycie materiałów o pożądanych właściwościach i dających się integrować z technologią krzemową stanowiłoby niezwykle wartościowy przyczynek do rozwoju nowoczesnych technologii telekomunikacyjnych.

Celem naukowym projektu jest **poszukiwanie materiałów** spośród stopów **typu Ge-IV**, do potencjalnych zastosowań w optoelektronice, jako emitery i detektory światła. Wybór tej grupy materiałów był podyktowany możliwością ich integracji z technologią krzemową, wiodącą w przemyśle układów zintegrowanych i przyrządów półprzewodnikowych. Zapotrzebowanie na emitery i detektory światła z kolei stymulowane jest rozwojem telekomunikacji światłowodowej.

Stawiamy hipotezę, że spośród bardzo wielu możliwych układów komponowanych z pierwiastków grupy IV istnieją takie, które mogą znaleźć szerokie zastosowanie w produkcji układów optoelektronicznych, w ramach znanych, dobrze opanowanych i stosunkowo tanich technologii. Istnieją już przesłanki świadczące o słuszności takiej hipotezy, np. wiadomo, że **Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>** w pewnym zakresie składów nadaje się do takich zastosowań. Istnieją jednak znaczne luki w wiedzy o tych układach. W ramach projektu planuje się przeprowadzić systematyczne badania stopów podwójnych **Ge<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>**, **Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>**, **Ge<sub>1-x</sub>Pb<sub>x</sub>**. Zostanie także zbadany **wpływ naprężeń**. W końcowym etapie zostanie zbadany **wpływ mieszania dodatkowych atomów z Grupy IV** (układy potrójne i poczwórne typu **Ge-IV**). Rezultatem będzie uporządkowana wiedza nt. właściwości fizycznych układów istotnych dla zastosowań optoelektronicznych (parametry geometryczne, struktury elektronowe, przerwy energetyczne, offsety pasm, masy efektywne etc.). Badania obliczeniowe będą wspierane **badaniami eksperymentalnymi** struktur elektronowych. Planuje się także wykorzystanie uzyskanych z obliczeń parametrów materiałowych w **modelach urządzeń optoelektronicznych**, w szczególności laserów opartych na studniach kwantowych.

Metoda badawcza to teoretyczne obliczenia ilościowe z zasad pierwszych (*ab initio*) oparte na teorii funkcjonału gęstości (DFT – *Density Functional Theory*), dające możliwość **przewidywania właściwości układów**. Stosunkowo szybko i tanio można uzyskać realistyczne **dane ilościowe** różnych charakterystyk materiałów (np. strukturalnych, elastycznych, elektronowych, i innych). Badania prowadzone będą przy ścisłej współpracy z Katedrą Fizyki Doświadczalnej Politechniki Wrocławskiej, gdzie wybrane układy zostaną zbadane eksperymentalnie. Zweryfikowane w ten sposób obliczenia staną się źródłem cennych informacji o układach do tej pory nieznanymi, potencjalnie przydatnymi do zastosowań optoelektronicznych.