

W tak skomplikowanych układach fizycznych jak hetero struktury półprzewodnikowe nie jest możliwe badanie zjawisk fizycznych związanych z transportem nośników ładunku i energii bez pomocy modelowania tych zjawisk i zaawansowanych obliczeń numerycznych. Równania transportu są równaniami nieliniowymi i samo ich rozwiązanie jest nie lada sztuką. Konieczne są tu metody iteracyjne i skonstruowanie odpowiednich schematów numerycznych zapewniających stabilność i efektywność rozwiązań. Ponieważ jesteśmy autorami zaawansowanych programów komputerowych i mamy ponad trzydziestoletnie doświadczenie związane z numerycznym modelowaniem zjawisk transportu i zjawisk fluktuacyjnych w hetero strukturach półprzewodnikowych, wiemy co trzeba zrobić aby te programy działały jeszcze lepiej i miały szersze niż dotychczas zastosowanie. Jest to podyktowane koniecznością analiz numerycznych i projektowania nowych typów detektorów podczerwieni wytwarzanych w oparciu o hetero struktury i supersieci.

Dlatego też głównym celem projektu jest udoskonalenie i rozwinięcie szerokiego spektrum modeli zjawisk fizycznych związanych z detekcją promieniowania elektromagnetycznego w detektorach półprzewodnikowych wytwarzanych z epitaksjalnych warstw przy użyciu technologii MOCVD i MBE. Modele te zawierają opis zjawisk transportu jak również dotyczą zjawisk fluktuacyjnych będących źródłem szumów prądowych w detektorach. Zostaną one opracowane poprzez zastosowanie podstawowych postulatów i praw termodynamiki procesów nierównowagowych. W rezultacie wyprowadzimy nierównowagowe statystyczne funkcje rozkładu dla nośników ładunku i zjonizowanych domieszek. Funkcje te zależą dodatkowo od gradientów parametrów intensywnych układu, tzn. gradientów temperatury i potencjałów elektrochemicznych. Wyprowadzimy je przez zastosowanie postulowanej przez nas oryginalnej zasady wariacyjnej, pozwalającej otrzymać bardziej ogólne i dokładne rezultaty niż otrzymywane standardowo przy pomocy rozwiązania kinetycznego równania Boltzmana. Sformułujemy równania bilansów energii dla nośników stanów zlokalizowanych, takich jak domieszki i defekty strukturalne, aby wyznaczyć ich własne potencjały elektrochemiczne. Otrzymane funkcje rozkładu jak i teoretyczne modele zjawisk fizycznych będą stanowić narzędzie do numerycznego projektowania detektorów podczerwieni o skomplikowanej strukturze wewnętrznej i geometrii, przy użyciu naszych własnych oryginalnych programów komputerowych.

Drugim istotnym celem projektu jest ulepszenie naszych, już istniejących programów komputerowych. Równania bilansów i równanie Poissona używane do opisu zjawisk transportu są równaniami nieliniowymi i mogą być rozwiązywane tylko metodami iteracyjnymi. W tym punkcie projektu opracujemy stabilne numerycznie schematy iteracyjne umożliwiające ograniczenie liczby iteracji poprzez automatyczny dobór siatki numerycznej i kroku czasowego. Wszystkie te zmiany znacząco skrócą czas obliczeń. Prace te dotyczyć też będą naszego programu do numerycznego modelowania zjawisk fluktuacyjnych. W zmodyfikowanej wersji będziemy mogli uwzględniać efekty tunelowe i powierzchniowe zjawiska generacyjno-rekombinacyjne jako dodatkowe źródła szumów prądowych.

Rezultaty naszych obliczeń będą konfrontowane z rezultatami eksperymentalnymi, zarówno tymi dostępnymi w literaturze jak i specjalnie wykonanymi heterostrukturami z HgCdTe techniką MBE w University of Western Australia w Perth (Zespół prof. Faraone) i techniką MOCVD w laboratorium WAT-Vigo System. Z zespołem z Perth współpracujemy od wielu lat, a ostatnio również w ramach projektu Harmonia DEC-2013/08/M/ST7/00913, który kończy się w sierpniu 2016, a którego jestem kierownikiem. Są oni silnie zainteresowani dalszą współpracą między naszymi zespołami.

Ostatecznym rezultatem naszego projektu będzie otrzymanie efektywnego numerycznego narzędzia do projektowania detektorów otrzymywanych na bazie silnie niejednorodnych struktur półprzewodnikowych.

Będziemy w stanie badać złożone zjawiska fotoelektryczne i fluktuacyjne w heterostrukturach stosując bardzo zaawansowane numeryczne obliczenia. Zwiększy się obszar stosowalności naszych programów dzięki kontroli stabilności i zbieżności nowych schematów iteracyjnych, w tym nowych schematów dla warunków brzegowych. Należy tu podkreślić, że efektywne numeryczne modelowanie detektorów podczerwieni pozwala znaleźć optymalne rozwiązania konstrukcyjne bez kosztownych i czasochłonnych prób technologicznych. Liczymy, że jeśli uda się zrealizować założenia projektu, to zaistniałyby przesłanki do skomercjalizowania naszych programów. Dostępne na rynku symulatory kosztują często drożej niż koszt proponowanego przez nas projektu.