

Streszczenie popularnonaukowe

Półprzewodnikowe materiały azotkowe są kluczowym składnikiem wielu urządzeń, przydatnych zarówno w życiu codziennym jak i mających zastosowania specjalistyczne. Dzięki specyficznej strukturze elektronowej materiały azotkowe służą do budowy diód *LED* (z ang. *Light Emitting Diode*), które emitują światło widzialne od barwy zielonej, poprzez niebieską, aż do fioletowej. Mogą również być źródłem promieniowania ultrafioletowego (*UV*) i podczerwonego (*IR*). Szczególnie popularne zastosowania mają diody *LED* wykonane z roztworów stałych InGaN. Są powszechnie wykorzystywane w energooszczędnych żarówkach i elektronicznych urządzeniach do archiwizacji danych typu Blue-ray.

Kontynuowane są badania nad kolejnymi możliwościami zastosowania półprzewodnikowych materiałów azotkowych. Celem tego projektu jest zbadanie przy użyciu metod obliczeniowych *ab initio* własności strukturalnych i struktury elektronowej roztworów stałych półprzewodzących azotków atomów grupy III (AlN, GaN i InN) z azotkami pierwiastków ziemi rzadkich (ScN, YN, LaN, LuN), oraz mieszanych azotków pierwiastków ziem rzadkich.

Zastosowane zostaną nowoczesne metody obliczeniowe oparte o teorię funkcjonału gęstości (DFT), które pozwalają nie tylko na odtworzenie eksperymentalnych własności wybranych układów, takich jak przerwa wzbroniona, ale również z powodzeniem służą jako efektywne narzędzie do przewidywania struktury elektronowej układów, które nie zostały jeszcze zrealizowane eksperymentalnie.

Planowane badania dostarczą nowych informacji na temat struktury i własności elektronowych wybranych półprzewodnikowych materiałów. Tak zdobyta wiedza wskaże możliwe kierunki do dalszych badań eksperymentalnych, nie tylko projektowania całkowicie nowych układów, ale również poznania i zrozumienia zjawisk występujących w znanych już materiałach w stanie równowagi a także pod wpływem naprężeń/odkształceń, które występują naturalnie w cienkich warstwach i heterostrukturach.