

Dynamika sieci i stabilność termodynamiczna powierzchni półprzewodników azotkowych wyliczane w oparciu o metody *ab initio*

W obecnej fazie rozwoju cywilizacyjnego oczekuje się od naukowców i inżynierów konstruowania coraz bardziej zaawansowanych przyrządów i urządzeń. Duża część z nich bazuje na materiałach półprzewodnikowych, wśród których znajdują się także azotki metali z grupy III układu okresowego. Półprzewodniki te już znalazły bardzo szerokie zastosowanie m.in. w optoelektronice, do przetwarzania sygnałów wielkiej częstotliwości i dużej mocy. Panuje opinia, że potencjalne możliwości tych materiałów wciąż nie są w pełni wykorzystane, głównie w związku z wyjątkowo trudną technologią ich wytwarzania, a także z powodu niedostatecznego poznania rozmaitych efektów w nich występujących. W celu zdobycia nowej i rozszerzenia już istniejącej wiedzy na ten temat w dalszym ciągu wskazane jest wykonywanie badań podstawowych dla tych półprzewodników. Jednym z kluczowych aspektów jest znajomość fizyki zjawisk zachodzących na powierzchni.

Celem projektu jest zbadanie wpływu zmian temperatury na stabilność struktur powierzchni półprzewodników azotkowych: GaN, InN, AlN, wychodząc od podstawowych praw natury (*ab initio*), takich jak prawa mechaniki kwantowej i fizyki statystycznej. Problemem który pozostaje do rozwiązania w przypadku tych materiałów jest brak zgodności pomiędzy wynikami powstałymi przy użyciu istniejącego w literaturze opisu teoretycznego a wynikami obserwacji i pomiarów, szczególnie w zakresie wysokich temperatur. Zauważyliśmy iż dostępne w literaturze analizy termodynamiczne często zaniedbują wkład pochodzący od drgań termicznych atomów i cząsteczek znajdujących się na powierzchni, co może być przyczyną dużych błędów w opisie ilościowym. Sednem naszego pomysłu jest wyznaczenie własności dynamicznych powierzchni właśnie za pomocą obliczeń z pierwszych zasad i uwzględnieniu ich w opisie termodynamicznym powierzchni. Najbardziej istotnym i czasochłonnym zadaniem będzie wykonanie obliczeń opartych na teorii funkcjonału gęstości (DFT), których wyniki pozwolą odtworzyć widma fononów (kwantów energii drgań sieci krystalicznych) dla układów reprezentujących powierzchnie. Na ich podstawie będziemy mogli określić brakujący w dotychczasowym opisie wkład związany ze zmianami temperaturowymi fazy skondensowanej. Pozwoli to wykonać analizę termodynamiczną z dużo większą dokładnością niż w dotychczasowych opracowaniach. W tym sensie nasz projekt jest krokiem w stronę przejścia od opisu zgodnego jakościowo do zgodnego ilościowo.

Uzyskane wyniki będą mogły być użyte w teoretycznych modelach wzrostu półprzewodników azotkowych, w szczególności dotyczących epitaksji z fazy gazowej. Udoskonalenie opisu teoretycznego stworzy możliwość dokładniejszego kontrolowania procesu wzrostu tych półprzewodników. Wiedza o warunkach panujących na powierzchni materiału może przełożyć się na umiejętność intencjonalnego wbudowywania określonych domieszek lub zmiany koncentracji niepożądanych zanieczyszczeń. Dobra znajomość fizyki powierzchni może pomóc w przełamywaniu kolejnych barier technologicznych we wzroście krysztalów, struktur i urządzeń azotkowych.