

Przewidywania ilościowe oparte na teorii funkcjonału gęstości (DFT) w inżynierii struktury pasmowej

Paweł Scharoch, Maciej P. Polak, Robert Kudrawiec

Wydział Podstawowych Problemów Techniki, Politechnika Wroclawska,
Wyb. Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław

Obliczenia *ab initio* oparte na teorii funkcjonału gęstości (*ang. Density Functional Theory, DFT*) stanowią nieocenione narzędzie badawcze dzięki zdolności ilościowego przewidywania różnych właściwości fizycznych układów. Mimo, że są to obliczenia dużej skali, wymagające komputerów dużej mocy i dużych zasobów obliczeniowych, w tym pamięci (dziesiątków gigabajtów RAM) i długich czasów pracy CPU (sięgających nawet dziesiątków lat), to dzięki nowoczesnej technice komputerowej, np. zrównoległaniu obliczeń, w stosunkowo krótkim czasie i niewielkim kosztem można uzyskiwać wiarygodne charakterystyki ilościowe parametrów fizycznych hipotetycznych materiałów, pod kątem ich potencjalnych zastosowań, wskazując kierunki rozwoju technologii i badań doświadczalnych.

Na przestrzeni ostatnich kilku lat, przy ścisłej współpracy z grupą fizyki doświadczalnej na Wydziale Podstawowych Problemów Techniki, Politechniki Wrocławskiej (Laboratorium Optycznej Spektroskopii Nanostruktur), wykonano szereg badań obliczeniowych metodami *ab initio*. Wyniki zastosowanych metod najpierw konfrontowane były z uzyskiwanymi w lokalnym laboratorium i/lub znanymi z literatury wynikami eksperymentalnymi. Po sprawdzeniu w ten sposób wiarygodności (najczęściej pozytywnie), te same metody stosowano do predykcji właściwości układów wcześniej niezbadanych w rzeczywistości. Badania koncentrowały się przede wszystkim wokół struktur elektronowych różnych układów półprzewodnikowych ($Ge(1-x)Snx$, $AlN_xP(1-x)$, stopy $Ga-V-Bi$ i $In-V-Bi$, MoS_2 , $MoSe_2$, WS_2 , WSe_2), w tym znaczące z punktu widzenia zastosowań odległości energetyczne w strukturach pasmowych (przerwa skośna, prosta (optyczna), rozszczepienie spin-orbita, bezwzględne położenia pasm względem próżni, tzw. offsety), a także ich zależności od składu w układach mieszanych, ciśnienia i naprężeń. Badano też inne charakterystyki, jak stałe elastyczne czy właściwości strukturalne. Uzyskano wiele satysfakcjonujących wyników, które opisano m.in. w publikacjach [1-9]. W prezentacji znajdują się najważniejsze i najciekawsze wyniki obliczeń, w porównaniu z eksperymentem, oraz najciekawsze przewidywane właściwości materiałów hipotetycznych.

- [1] M.P. Polak, P. Scharoch, R. Kudrawiec, J. Phys. D. (2017), doi:
- [2] J. Kopaczek, M.P. Polak, P. Scharoch, K. Wu, et al., J. Appl. Phys. 119(23) (2016).
- [3] F. Dybała, M.P. Polak, J. Kopaczek, P. Scharoch, K. Wu, et al., Sci Rep 6 (2016).
- [4] T. Woźniak T, P. Scharoch, M.J. Winiarski., Acta Phys Pol A 129(1):A56-A58 (2016).
- [5] M.P. Polak, M.J. Winiarski, K. Wittek, P. Scharoch P., Adv Mater Sci Eng 2016 (2016).
- [6] M.P. Polak, P. Scharoch P, R. Kudrawiec, Semicond Sci Technol 30(9) (2015).
- [7] J. Kopaczek, R. Kudrawiec, M.P. Polak, P. Scharoch, M. Birkett, T.D. Veal, et al., Appl. Phys. Lett. 105(22) (2014).
- [8] M.P. Polak, P. Scharoch, R. Kudrawiec, J. Kopaczek, M.J. Winiarski, W.M. Linhart, et al., J Phys D 47(35) (2014).
- [9] R. Kudrawiec, J. Kopaczek, M.P. Polak, P. Scharoch, M. Gładysiewicz, K. Misiewicz, et al., J Appl Phys 116(23) (2014).