

Streszczenie

Wpływ defektów punktowych na termiczną stabilność układu wielu studni kwantowych InGaN/GaN

Prezentowana rozprawa zawiera wyniki modelowania i analizę możliwych procesów zachodzących na różnych etapach wytwarzania cienkich warstw $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, hodowanych za pomocą epitaksjalnego osadzania z fazy gazowej związków metaloorganicznych (MOVPE). Ta praca ma charakter teoretyczny i opiera się na obliczeniach kwantowo-mechanicznych z wykorzystaniem teorii funkcjonatu gęstości (DFT) przy użyciu modeli superkomórki oraz supersieci w uogólnionym przybliżeniu gradientowym (GGA). Na potrzeby rozprawy została opracowana nowa metodyka obliczania wysokości barier energetycznych na dyfuzję defektów punktowych przez międzypowierzchnię dwóch materiałów. W pierwszej kolejności przeprowadzono symulacje dotyczące dyfuzji wakansów VN, VGa oraz VIn w układach $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, które posłużyły jako punkt startowy do analizy procesów termodynamicznych zachodzących w tych układach. Zaobserwowano pewną energetyczną „hierarchię” barier na migrację poszczególnych defektów punktowych. Dodatkowo zaobserwowano dużo mniejsze bariery energetyczne na migrację kompleksu $\text{InGa} + \text{VGa}$ niż dla pojedynczego wakansu VGa. W kolejnym kroku stosując przybliżenie harmoniczne i harmoniczną teorię stanu przejściowego, obliczone zostały wysokości barier energetycznych dla atomów In i Ga dyfundujących w układach $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0; 0,11; 0,22$), częstotliwości drgań układów $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ w obecności migrujących defektów punktowych, zależności temperaturowe barier energetycznych migracji defektów oraz współczynniki dyfuzji atomów Ga i In migrujących w układach $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Na podstawie analizy zarówno dyfuzji defektów punktowych w układach objętościowych $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ oraz na międzypowierzchniach $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, jak też temperaturowych zależności współczynników dyfuzji, wyjaśniono model termicznej dekompozycji układu wielu studni kwantowych InGaN/GaN za pomocą efektu Kirkendalla.