

Abstrakt

Tytuł rozprawy:

Modelowanie diod świecących i laserowych na bazie heterostruktur azotkowych

Istniejące schematy obliczeniowe stosowane do modelowania urządzeń optoelektronicznych oparte są na rozwiązywaniu (semi-klasycznych ze swojej natury) równań dryfu i dyfuzji dla całego urządzenia, albo na przeprowadzeniu obliczeń kwantowo-mechanicznych tylko dla aktywnych części układu. Celem niniejszej rozprawy było zdiagnozowanie istotnych mechanizmów fizycznych wpływających na opis charakterystyk prądowo-napięciowych w układach optoelektronicznych opartych na heterostrukturach azotkowych oraz ulepszenie schematu obliczeniowego pozwalającego na wiarygodne modelowanie elektrycznych własności takich urządzeń. Ze względu na silne pola elektryczne powstające w strukturach azotkowych z powodu silnego piezoelektrycznego i pyroelektrycznego charakteru tych materiałów, duże przerwy energetyczne (w stosunku do analogicznych urządzeń opartych o arsenki stosowanych w „czerwonej” optoelektronice) oraz dużą liczbę wąskich studni i barier, urządzenia azotkowe stanowią niezwykle trudny obiekt dla modelowania w ramach modelu dryfu-dyfuzji, który w standardowych algorytmach bardzo często nie daje zbieżnych rozwiązań. Dlatego pierwszym zadaniem było opracowanie metody rozwiązywania równań dryfu i dyfuzji pozwalającej na otrzymywanie zbieżnych rozwiązań dla struktur azotkowych. Opracowana skuteczna metoda całkowania równań dryfu i dyfuzji została zaimplementowana w kodzie numerycznym **nextnano**³, który był podstawowym narzędziem badawczym zastosowanym w pracy doktorskiej.

W drugim kroku przebadano różne modele mechanizmów rekombinacji i zaimplementowano w kodzie **nextnano**³ model uwzględniający obecność silnych pól elektrycznych. Stosując zmodyfikowany kod **nextnano**³, przeprowadzono modelowanie realistycznych struktur stosowanych w diodach świecących (LED) oraz diodach laserowych (LD) wytwarzanych w Instytucie Wysokich Ciśnień PAN.

Trzecim istotnym elementem rozprawy były obliczenia kwantowo-mechaniczne prądu dla aktywnych części badanych struktur i porównanie z opisem na podstawie modelu dryfu i dyfuzji. Analizy transportu kwantowego dokonano przy użyciu samodzielnie opracowanej aplikacji wyznaczającej w sposób kwantowo-mechaniczny współczynnik transmisji $T(E)$, a następnie wykorzystującej go do policzenia charakterystyk prądowo-napięciowych rozpatrywanych heterostruktur. Przeprowadzone obliczenia jednoznacznie wskazują, że poprawne modelowanie urządzeń opartych o heterostruktury azotkowe nie może być przeprowadzone posługując się wyłącznie modelem dryfu-dyfuzji i implementacja efektów kwantowych jest konieczna. Niniejsza rozprawa stworzyła podstawy do stworzenia takiego hybrydowego opisu urządzeń, z jednej strony opisującego aktywne części urządzenia w modelu kwantowo-mechanicznym, a z drugiej strony klasyczne części, służące głównie doprowadzeniu nośników do obszarów aktywnych, układu w modelu dryfu i dyfuzji.