

mgr inż. Kamil Czelej

## Density functional theory investigations of the electronic structure and magneto–optical properties of point defects and their complexes in diamond

**STRESZCZENIE:** Wysokiej jakości diament z odpowiednio zaprojektowaną strukturą elektronową jest uważany jako kluczowy materiał w elektronice dużej mocy, optoelektronice oraz w wyłaniającej się nowej technologii kwantowego przetwarzania informacji. Wiele unikatowych właściwości diamentu wynika z obecności defektów punktowych i ich kompleksów, które mogą zostać wprowadzone do sieci diamentu podczas procesu jego syntezy. W celu zrozumienia wpływu wybranych defektów na strukturę elektronową, właściwości elektryczne, magnetyczne i optyczne przeprowadziłem obliczenia teoretyczne bazujące na zaawansowanej teorii funkcjonału gęstości w ramach niniejszej dysertacji.

Jednym z najistotniejszych problemów w obszarze elektroniki wysokiej mocy na bazie diamentu jest względnie wysoka energia aktywacji donorów diamentu domieszkowanego fosforem. Obliczenia przeprowadzone w niniejszej rozprawie pokazują, że zarówno arsen jak i antymon mogą generować płytszy poziom donorowy niż węzłowy P, aczkolwiek ze względu na ich bardzo dużą energię tworzenia, wytworzenie diamentu domieszkowanego arsenem lub antymonem, cechującego się dostateczną koncentracją tych pierwiastków w miejscach węzłowych może stanowić duże wyzwanie.

Z uwagi na to, że wodór jest najpowszechniejszym pierwiastkiem w środowisku CVD wzrostu sztucznego diamentu, różne klastry wodoru z monowakansami, kompleksami fosfor–wakans (PV) i fosfor–diwakans (PV<sub>2</sub>) zostały szczegółowo przebadane. Struktura elektronowa każdego z analizowanych kompleksów została opisana przy użyciu teorii grup oraz obliczonych wartości własnych orbitali Kohna–Shama. W niniejszej rozprawie doktorskiej stworzyłem obszerną bazę danych zawierającą: linie zero–fononowe, stałe struktury nadsubtelnej oraz kwazilokalne mody fononowe aby wspomóc eksperymentalną identyfikację niezidentyfikowanych dotąd kompleksów typu H–V i H–P–V w diamencie. W celu dokładnego opisu struktury elektronowej wymagających defektów o silnie skorelowanych elektronach zastosowano rozszerzony model Hamiltonianu Hubbarda z parametrami uzyskanymi w obliczeniach *ab initio*. Niektóre z analizowanych kompleksów okazały się obiecującymi kandydatami na zastosowanie w technologii kwantowego przetwarzania informacji i dla jednego z kompleksów, PV<sub>2</sub>H<sup>0</sup>, zaproponowano dodatkowo przebieg cyklu optyczno–polaryzacyjnego.

Metale przejściowe obecne w sieci diamentu mogą tworzyć paramagnetyczne kompleksy z wakansami i azotem. Ze względu na obecność orbitali d metalu przejściowego w strukturze elektronowej sp<sup>3</sup> hosta, kompleksy zawierające metal przejściowy w diamencie mogą posiadać dodatkowo unikatowe cechy, wywołujące jasną fotoluminescencję oraz stawiające je w roli atrakcyjnych kandydatów na zastosowania w spintronice. Zmotywowany niedawnymi obserwacjami eksperymentalnymi, w swoich badaniach skupiłem się na kompleksach zawierających tytan, wakans i azot w diamencie. Uzyskane wyniki symulacji numerycznych, tj. linie zero–fononowe, stałe struktury nadsubtelnej oraz kwazilokalne mody fononowe są zgodne z obserwacjami eksperymentalnymi oraz dowodzą, że centra barwne N3 i OK1 mają rzeczywiście strukturę kompleksów tytan–azot (Ti–N) i tytan–wakans–azot (TiV–N). W szczególności ten drugi okazał się interesującym kandydatem w kontekście zastosowania jako solidny emiter pojedynczych fotonów.

podpis promotora

K. Knydlovski

podpis autora